ISSN 2224-8412



11(2) 🔷 2014

математическая физика и моделирование



Nanostructures. Mathematical physics & modelling

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures. Mathematical Physics & Modelling

2014, volume 11(2)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Объединенная редколлегия:

Д.В. Быков, И.В. Волович, В.Л. Голо, В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, М.В. Карасев (зам. главного редактора), Ю.А. Косевич, Ю.Е. Лозовик, М.А. Мазо, В.П. Маслов (главный редактор), А.В. Махиборода (ответств. секретарь), А.Ю. Морозов, С.А. Никитов, Ю.И. Сезонов, А.К. Скуратов, И.С. Смирнов, Р.А. Сурис, В.А. Тулин, В.Е. Фортов, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик, Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан; иностранные члены: А.С. Бакай, А. Шимизу; информационное обеспечение наноиндустрии: В.Н. Азаров, А.Д. Иванников, Ю.Л. Ижванов, В.П. Кулагин, А.Н. Тихонов

Электронная версия журнала размещается на сайте http://nano-journal.ru

Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, НИУ ВШЭ, Московский институт электроники и математики, nano@miem.edu.ru

Москва

Содержание

Е.А. Вилкул, А.А. Тужилин
Сеометрия аминокислот и полипептидов:
лучай рентгеноструктурного анализа
3.П. Маслов
Устранение устоявшихся математических ошибок
з термодинамике и квантовой статистике. Новая термодинамика
И.И. Монастырский, П.В. Сасоров
Инварианты Хопфа в магнитной гидродинамике
и в суперскрученной ДНК
А.А. Толченников, В.Л. Чернышев, А.И. Шафаревич
Уравнения Шрёдингера на графах и сингулярных пространствах:
спектральные свойства и квазиклассическая динамика
юкализованных пакетов

Информация и правила для авторов	105
----------------------------------	-----

Contents

E.A. Vilkul, A.A. Tuzhilin Geometry of Amino Acids and Polypeptides: X-ray case
V.P. Maslov Elimination of Preconceived Mathematical Errors in Thermodynamics
and Quantum Statistics. New Thermodynamics
M. Monastyrsky, P. Sasorov
Topological invariants in magnetohydrodynamics and DNA supercoiling
A.A. Tolchennikov, V.L. Chernyshev, A.I. Shafarevich
Schrödinger equation on graphs and singular spaces:
spectral properties and semiclassical dynamics of localized packets

The information and rules for authors		105
---------------------------------------	--	-----

ГЕОМЕТРИЯ АМИНОКИСЛОТ И ПОЛИПЕПТИДОВ: СЛУЧАЙ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

Е.А. Вилкул, А.А. Тужилин

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

tuz@mech.math.msu.su

Поступила 02.10.2014

Настоящая работа продолжает тестирование Protein Data Bank, начатое в [1]: теперь мы интересуемся той частью базы полипептидов, которая была получена с помощью рентгеноструктурного анализа. Мы покажем, что все "патологии", обнаруженные нами в случае ядерно-магнитного резонанса, встречаются и здесь. Кроме того, мы продемонстрируем, что хорошее разрешение (оно отражается в параметре RESOLUTION) не гарантирует отсутствие "патологий". Наконец, мы обсудим нарушение закона плоскости Полинга и покажем, что существенные нарушения достаточно часто встречаются как в спиралях, так и в листах.

УДК 514.8+57.087+51-76

Введение

В предыдущей статье [1] было проведено исследование файлов базы Protein Data Bank (PDB), в которых отражены результаты изучения полипептидов, полученные путем ядерного магнитного резонанса. В процессе тестирования базы мы неоднократно сталкивались с различного рода неточностями, которые, как мы думаем, могут быть связаны как с фактическими ошибками, возникшими во время формирования файлов, так и с погрешностями самого метода ядерного магнитного резонанса. В настоящей статье мы расскажем об аналогичном нашем исследовании, проведенном для полипептидов, полученных путем рентгеноструктурного анализа, который, как считается, дает более точные результаты.

Отметим, что в рассматриваемых нами файлах содержится ровно одна модель, поэтому раздел, посвященный сравнению свойств разных моделей полипептидов будет опущен. Впрочем, ряд полипептидов состоит из нескольких субъединиц. Для начала мы решили ограничиться первой из них.

Как и раньше, в первом разделе статьи будет описана предварительная подготовка базы, после чего мы изложим результаты, связанные с исследованием отклонений длин ковалентных связей, расстояний между последовательными альфа-углеродами, углов между смежными ковалентными связями, а также проверкой "закона плоскости" Полинга [2].

Авторы выражают благодарность профессору В.Л. Голо, научному сотруднику Я.Г. Гурскому, профессору А.О. Иванову, д.ф.-м.н. Ю.Ф. Крупянскому и слушателям его семинара, профессору А.С. Мищенко, д.х.н. В.И. Польшакову и слушателям его семинара, академику РАН, профессору А.Т. Фоменко, к.ф.-м.н. А.К. Шайтану, профессору К.В. Шайтану и слушателям его семинара за внимание к работе и многочисленные полезные обсуждения.

1 Protein Data Bank

В работе [1] мы уже описали, как скачать все необходимые файлы из PDB. Мы не станем повторять это описание. Отметим лишь, что в данном случае наша база оказалась почти в 10 раз больше предыдущей: на момент завершения скачивания она содержала 83194 файла. Дальнейшая работа состояла из двух шагов: предварительной обработки базы (выделение файлов с "однородным" описанием) и метрического анализа. В работе [1] первая часть содержится в разделе "Ряд трудностей, возникающих при работе с pdb-файлами". Оказалось, что почти все проблемы этого раздела имеют место и в случае рентгеноструктурного анализа. Обсудим детали.

1.1 Ряд трудностей, возникающих при работе с pdb-файлами

(1) Хотя строки "ATOM..." присутствуют почти во всех файлах, имеется исключение: файл 4OYW.pdb, после выбрасывания которого наша база стала содержать 83193 файла.

(2) Теперь избавимся от файлов, в которых между первой строчкой "ATOM..." и первой строчкой "TER..." имеются строки, не начинающиеся со слова "ATOM". В результате остается 55024 файла.

(3) На сей раз мы столкнулись с еще одной проблемой: в некоторых из оставшихся файлов (таких файлов 55) на месте аминокислот встречаются обозначения, отличные от 20 стандартных. Имеется четыре таких обозначения: UNK, GLX, ASX и SEC. Первое из них, UNK, содержится в 51 файле, например в 155C.pdb, и говорит о том, что в соответствующей области аминокислотная последовательность определена не была. Второе, GLX, содержится ровно в одном файле, а именно, в 1KP0.pdb, третье, ASX, — в трех файлах: 1KP0.pdb, 2ATC.pdb и 2FMD.pdb, наконец, четвертое, SEC, — ровно в одном файле 2IV2.pdb. После выкидывания всех этих файлов осталось 54969 штук. (4) Следующий шаг — определить наиболее популярные составы аминокислот. Напомним, что, как было выяснено в нашем предыдущем исследовании, аминокислоты, имеющие одни и те же имена, могут быть представлены разными атомными составами. На сей раз это также было обнаружено. Приведем пример возможностей для глицина.

{N, CA, C, O}, {N, CA, C, O, H}}, {CA},
{N, CA, C, O, OXT}, {N, CA, C, O, H, HA2, HA3},
{N, CA, C, O, H1, H2, H3}, {N, CA, C, O, OXT, H}
{N, CA, C}, {N, CA, C, H}, {N, CA}.

Мы снова выбрали наиболее часто встречающиеся последовательности и назвали их *стандартными*. Вот полученный список:

```
GLY: N,CA,C,O;
ALA: N,CA,C,O,CB;
SER: N,CA,C,O,CB,OG;
CYS: N,CA,C,O,CB,SG;
PRO: N,CA,C,O,CB,CG,CD;
VAL: N,CA,C,O,CB,CG1,CG2;
THR: N,CA,C,O,CB,OG1,CG2;
ILE: N,CA,C,O,CB,CG1,CG2,CD1;
LEU: N,CA,C,O,CB,CG,CD1,CD2;
ASP: N,CA,C,O,CB,CG,OD1,OD2;
ASN: N,CA,C,O,CB,CG,OD1,ND2;
GLU: N,CA,C,O,CB,CG,CD,OE1,OE2;
GLN: N,CA,C,O,CB,CG,CD,OE1,NE2;
MET: N,CA,C,O,CB,CG,SD,CE;
LYS: N,CA,C,O,CB,CG,CD,CE,NZ;
ARG: N,CA,C,O,CB,CG,CD,NE,CZ,NH1,NH2;
HIS: N,CA,C,O,CB,CG,ND1,CD2, CE1,NE2;
PHE: N,CA,C,O,CB,CG,CD1,CD2,CE1,CE2,CZ;
TYR: N,CA,C,O,CB,CG,CD1,CD2,CE1,CE2,CZ,OH;
TRP: N,CA,C,O,CB,CG,CD1,CD2,NE1,CE2,CE3,CZ2,CZ3,CH2.
```

Замечание 1.1. Отметим, что при разбиении строк "АТОМ..." на списки, каждый из которых относится к отдельной аминокислоте, мы использовали не только позиции 23–26, соответствующие номерам аминокислот, но также и позицию 27, в которой располагается код вставки остатка iCode. Тем самым, мы избежали объединения атомов последовательных аминокислот с одними и теми же номерами в списки единых аминокислот.

(5) Полученные в предыдущем пункте наиболее популярные атомные составы аминокислот соответствуют внутренним (не концевым) аминокислотам. На данном этапе мы прошли по всем оставшимся на предыдущих шагах pdb-файлам и выбрали те, в которых все внутренние аминокислоты — стандартные. Теперь наша база содержит 38969 файлов.

(6) Для ускорения расчетов, мы преобразовали каждый файл в файл такого же "короткого формата", как описано в [1]. Таким образом, если начальная база полипептидов, полученных методом рентгеноструктурного анализа, занимала больше 48 гигабайт, то нынешняя занимает около 2.2 гигабайта.

2 Метрический анализ PDB

В данном разделе будут описаны результаты, связанные с метрическим анализом PDB-базы по таким критериям, как разброс длин ковалентных связей, изменение расстояний между последовательными альфа-углеродами, отклонение от закона плоскости, разброс углов между смежными ковалентными связями. Кроме того, будет исследована зависимость полученных результатов от значения параметра RESOLUTION, указанного к каждом PDB-файле, которое отображает погрешность измерений в методе рентгено-структурного анализа.

2.1 Оценка разброса длин ковалентных связей в аминокислотах

Для оценки отклонений длин ковалентных связей мы решили на сей раз поступить следующим образом.

(1) Для всех аминокислот вычислим среднее значение длин каждой ковалентной связи. В результате мы получили следующую таблицу значений (каждый подсписок соответствует одной из 20 аминокислот, упорядоченных как в приведенном выше списке "стандартных" атомных составов):

```
\{1.45521, 1.51779, 1.23268\},\
\{1.46013, 1.52596, 1.23239, 1.52472\},\
\{1.45951, 1.52527, 1.23236, 1.53025, 1.41734\},\
{1.45905, 1.52396, 1.23188, 1.52988, 1.80867},
{1.46566, 1.52694, 1.23286, 1.53006, 1.49772, 1.50819, 1.47469},
\{1.45916, 1.52657, 1.23243, 1.54749, 1.5243, 1.52369\},\
\{1.45899, 1.52566, 1.23236, 1.5438, 1.5244, 1.43266\},\
{1.45897, 1.52652, 1.23229, 1.54736, 1.5323, 1.52828, 1.51974},
\{1.45914, 1.52513, 1.23195, 1.53164, 1.53131, 1.52248, 1.52331\},\
{1.46025, 1.52626, 1.23203, 1.5325, 1.51964, 1.25094, 1.25116},
{1.45962, 1.5253, 1.23203, 1.53204, 1.51739, 1.32877, 1.23362},
{1.45943, 1.52573, 1.23178, 1.53136, 1.52319, 1.52195, 1.25228,
  1.25268\},
{1.45941, 1.52523, 1.23184, 1.53095, 1.52258, 1.51929, 1.23456,
  1.32996},
{1.45908, 1.52481, 1.23175, 1.53067, 1.52073, 1.80633, 1.78985},
{1.45977, 1.526, 1.23202, 1.53135, 1.52309, 1.52524, 1.52574,
  1.49397\},
{1.45947, 1.52559, 1.23186, 1.53114, 1.52137, 1.52261, 1.46139,
  1.33145, 1.32968, 1.32832},
{1.45962, 1.52444, 1.23194, 1.53196, 1.49771, 1.3562, 1.37769,
  1.37283, 1.32302, 1.32226},
{1.45906, 1.52449, 1.23197, 1.5327, 1.50417, 1.39119, 1.39097,
  1.3937, 1.39364, 1.38975, 1.38982\},
{1.459, 1.52424, 1.23211, 1.53248, 1.51175, 1.3942, 1.39382,
  1.39219, 1.39192, 1.38553, 1.38515, 1.37671},
{1.45931, 1.52436, 1.23219, 1.53222, 1.49989, 1.3675, 1.43262,
  1.37472, 1.41345, 1.40116, 1.39836, 1.36942, 1.39218,
  1.37377, 1.40559\};
```

(2) Для каждого полипептида подсчитаем максимальное относительное отклонение от средних значений длин всех ковалентных связей в аминокислотах и сохраним значения в список (на первом месте каждой записи стоит имя полипептида, на втором — значение максимального отклонения в процентах):

{"101M",	4.37}
{"102L",	6.1}
{"102M",	4.34}
{"103L",	5.86}
{"103M",	4.32}
{"104L",	6.64}
{"104M",	3.92}
{"105M",	3.61}
{"106M",	2.71}

. .

(3) Построим график распределения количества полипептидов (ордината) с тем или иным максимальным отклонением (абсцисса), см. рис. 1.

Приведем начальный отрезок численных значений этого графика:

{327, 4653, 7121, 6267, 5119, 4461, 3199, 2310, 1504, 964, 633, 404, 368, 244, 174, 163, 163, 103, 93, 69, 53, 76, 32, 37, 49, 32, 29, 24, 21, 11, 20, 19, 11, 7, 11, 11, 6, 8, 2, 7, 9, 6, 6, 6, 6, 11, 3, 4, 2, 4, 2, 2, 6, 2, 1, 4, 3, 3, 2, 4, 3, 2, 4, 1, 4, 1, 0, 2, 0, 2, 2, 2, ... 0, 0, 1}.



Рис. 1. График распределения количества полипептидов (ордината) с тем или иным максимальным отклонением (абсцисса).

Из рис. 1 видно, что в некоторых файлах отклонение превышает 1000 процентов! Откуда же берутся такие "патологии"? Одна из гипотез состояла в существовании погрешностей при использовании метода рентгеноструктурного анализа. Как было выяснено из бесед со специалистами, погрешности метода отвечает параметр RESOLUTION (или, как его еще называют, *разрешение*), который содержится в каждом pdb-файле: чем меньше значение этого параметра, тем точнее полученные результаты. Мы решили посмотреть, всегда ли "патологии" появляются только при "больших" значениях параметра RESOLUTION.

Для начала мы нашли файл с отклонением, превышающим 1000%: им оказался 1SBT. На рис. 2 приведено изображение аспарагина из полипептида 1SBT, на котором такое огромное отклонение достигается. Отметим, что в этом случае параметр RESOLUTION равен 2.5.

Следующее по величине отклонение возникает в файле 1W5Q, см. рис. 3. Здесь разрешение существенно меньше и равно 1.4, тем не менее, прослеживается явное нарушение длины связи CZ-NH2. Может быть, значение RESOLUTION все еще недостаточно мало?

Чтобы разобраться с этим вопросом, построим график распределения параметра RESOLUTION (ось ординат соответствует количеству файлов, абсцисса — значению параметра), см. рис. 4, и приведем некоторые численные данные:

- (1) минимальное разрешение равно 0.2, максимальное примерно 9;
- (2) его среднее значение по всей базе равно 2.165;
- (3) количество файлов с RESOLUTION меньшим 1.4 мало, а именно, 585 файла из 38969.



Рис. 2. Аспарагин, на котором максимальное отклонение от средних длин ковалентных связей превышает 1000%.



Рис. 3. Аргенин, на котором достигается второе по величине максимальное отклонение от средних длин ковалентных связей (превышает 450%).



Рис. 4. График распределения параметра RESOLUTION (ордината количество файлов, абсцисса значение параметра RESOLUTION).

Приведенные нами данные показывают, что разрешение 1.4, возникающее в рассмотренном выше примере, является достаточно маленьким относительно остальных. Тем не менее, максимальное относительное отклонение длин ковалентных связей свидетельствует о наличии существенных ошибок даже при таком разрешении. Приведем список всех файлов со значительными отклонениями от среднего (большими 100 процентов) вместе со значениями их отклонений и разрешений:

{1SBT,	1001.55, 2.50},	{1W5Q,	474.02, 1.4},
{2CAB,	359.65, 2.00},	{3CD2,	280.92, 2.50},
{1QB7,	276.43, 1.50},	{1J4X,	264.23, 2.75},
{10JM,	251.45, 1.78},	{10JP,	247.44, 1.90},
{2JE1,	246.91, 2.69},	{10JN,	244.06, 1.60},
{2BV9,	214.91, 1.50},	{1H18,	211.2, 2.3},
{1H16,	195.67, 1.53},	{2J07,	191.16, 1.95},
{1H17,	188.08, 1.75},	{1W5O,	183.2, 1.85},
{2VLR,	170.28, 2.3 },	{2BS2,	168.73, 1.78},
{1KRL,	163.59, 1.90},	{2014,	153.36, 2.20},
{1HCH,	152.07, 1.57},	{1MOO,	143.9, 2.40},
{1H5E,	137.91, 1.60},	{1H5D,	137.87, 1.60},
{1H5F,	137.63, 1.6 },	{1E7R,	129.46, 1.6},
{1E6Z,	128.29, 1.99},	{2V28,	128.12, 1.95},
{1LZ9,	127.24, 1.70},	{1W8L,	117.61, 1.8},
{1GQ8,	116.01, 1.75},	{1AZN,	113.76, 2.60},
{1JXB,	109.41, 1.60},	{1UYC,	108.16, 2.0},
{1MC9,	106.14, 1.70},	{2W27,	105.15, 2.80},
{1GTJ,	105.11, 1.75},	{1S6P,	104.44, 2.90},
{1EGD,	100.1, 2.40}.		

Заметим, что для некоторых из этих файлов разрешение также невелико (не превосходит 1.6), тем не менее, в соответствующих полипептидах наблюдаются аномальные отклонения в длинах ковалентных связей. Для наглядности, приведем изображения шести аминокислот из файлов 2BV9, 1E7R, 1H5E, 1QB7, 1OJN, 1HCH, на которых достигаются максимальные отклонения (см. рис. 5).

Рассмотренные только что примеры опровергают предположение о том, что возникновение патологий напрямую связано с разрешением метода рентгеноструктурного анализа.

После детального анализа было выявлено, что заметными отклонениями от среднего значения длин ковалентных связей можно считать те, которые превосходят 22%. Таких файлов оказалось 511 штук. Как и раньше, мы исключили их из нашей базы.

2.2 Оценка разброса углов в полипептидах

Было решено немного изменить порядок исследования и форму изложения результатов по сравнению с предыдущей статьей. Для оценки разброса углов между смежными ковалентными связями в аминокислотах мы поступили следующим образом.

(1) Для каждой из 20 стандартных аминокислот вычислили среднее значение величин углов между соседними связями, получили таблицу, каждый подсписок которой соответствует своей аминокислоте (порядок аминокислот такой же, как и выше):

{113.062, 120.507},



Рис. 5. Изображения "аномальных" аминокислот из файлов 2BV9, 1E7R, 1H5E, 1QB7, 1OJN, 1HCH.

 $\{111.078, 110.294, 110.204, 120.56\},\$ $\{111.313, 110.411, 109.772, 120.529, 110.787\},\$ $\{111.073, 110.454, 109.804, 120.515, 113.921\},\$ {111.37, 112.698, 103.246, 111.176, 120.284, 103.934, 104.367, $102.715\},$ {110.102, 111.453, 109.901, 120.576, 110.639, 110.348, 110.407}, {110.816, 111.236, 109.365, 120.536, 109.243, 111.025, 109.058}, {110.041, 111.38, 109.953, 120.567, 110.249, 110.605, 110.618, 113.947}. {110.964, 110.414, 109.894, 120.525, 116.796, 110.284, 110.37, $110.57\},$ {111.113, 110.493, 110.012, 120.544, 112.881, 119.014, 118.389, $122.572\},$ {111.634, 110.463, 110.123, 120.541, 112.638, 120.888, 116.561, 122.521}, $\{111.27, 110.504, 109.939, 120.547, 114.135, 113.063, 118.832, \}$ 118.243, 122.905}, {111.158, 110.52, 109.909, 120.53, 114.012, 112.712, 120.89, $116.554, 122.532\},$ {111.1, 110.503, 109.903, 120.551, 113.988, 112.496, 100.816}, {111.093, 110.498, 109.958, 120.554, 114.175, 111.522, 111.623, 111.951}, {111.068, 110.507, 109.967, 120.554, 114.063, 111.696, 111.805, 124.576, 120.537, 119.81, 119.631}, {111.26, 110.454, 109.957, 120.496, 113.631, 122.75, 130.926,

106.271, 109.185, 107.126, 108.485, 108.917},

{111.004, 110.546, 109.912, 120.56, 113.828, 120.641, 120.514,

118.799, 120.806, 120.808, 119.863, 119.868, 119.831},

{111.132, 110.494, 109.847, 120.546, 113.8, 120.888, 120.784, 118.281, 121.092, 121.108, 119.497, 119.513, 120.485, 119.779, 119.72},

{111.272, 110.517, 109.88, 120.541, 113.868, 126.896, 126.683, 106.361, 110.06, 107.094, 133.959, 118.934, 108.981, 107.486, 122.375, 130.127, 118.675, 117.496, 121.049, 121.449}

Заметим, что минимальная величина в этом списке равна 100.82, а максимальная — 133.96.

(2) Для каждого полипептида вычислили максимальное среди отклонений углов от их средних значений, полученные данные сохранили в файл.

Построим график распределения максимальных отклонений углов в полипептидах от их среднего значения, где абсцисса соответствует величине отклонения в процентах, а ордината — количеству файлов (см. рис. 6).

Приведем также список точных численных значений этого графика:



Рис. 6. График распределения максимальных отклонений углов в полипептидах от их среднего значения: абсцисса отклонение в процентах, ордината количество файлов.

Из графика видно, что максимальное относительное отклонение углов может быть более 100%. Как и в предыдущем разделе, проверим, возникают ли большие отклонения в углах только при большом значении разрешения RESOLUTION. Для этого приведем список полипептидов, имеющих максимальные отклонения более 50 процентов, вместе со значениями их отклонений и разрешений:

{4ILX, 99.95, 1.6}, {1H55, 96.91, 1.61}, {1K1B, 88.65, 1.9}, {2JIX, 63.74, 3.2}, {1SAC, 51.74, 2.}, {3MCG, 51.24, 2.}, {1CPS, 51.11, 2.25}, {2YWV, 50.45, 1.75}.

Заметим, что в списке присутствуют как большие значения разрешений (например, 3.2), так и достаточно маленькие (1.6). Таким образом, прямой зависимости между возникновением "патологий" и параметром RESOLUTION снова не прослеживается.

Построив изображение глутаминовой кислоты из файла 4ILX, на которой достигается отклонение углов от среднего почти в 100 процентов (см. рис. 7), мы столкнулись с интересным явлением: на первый взгляд, аминокислота выглядит абсолютно нормально. Тем не менее, после вывода последовательности атомов в этой аминокислоте

N, CA, C, O, CB ,CG, CD, OE1, OE2,

а также значений отклонений от среднего каждого из углов было выяснено, что два кислорода OE1 и OE2 "склеились".

Аналогичная ошибка прослеживается и для полипептида 1H55 со вторым по величине отклонением от среднего: в валине, изображенном на рис. 8, два атома CG1 и CG2 имеют почти одинаковые координаты.

Приведем изображения всех аминокислот, в которых отклонения превышают 50%, см. рис. 9. Помимо вышеописанного эффекта "склеивания" атомов, можно встретить также явные нарушения в бензольном кольце у фенилаланина, а также образование почти развернутого угла CD-CG-CB в некоторых из аминокислот.

Дальнейшее детальное исследование базы показало, что отклонения углов от среднего значения менее 30% можно считать несущественными. После исключения из базы 274 полипептидов с существенными отклонениями осталось 38184 файла.



Рис. 7. Глутаминовая кислота из полипептида 4ILX: кислороды OE1 и OE2 ошибочно совмещены.



Рис. 8. Валин из полипептида 1H55: углероды CG1 и CG2 ошибочно совмещены.

2.3 Оценка разброса длин пептидных связей

Стоит напомнить, что все вышеописанные исследования мы проводили лишь для внутренних аминокислот каждого полипептида, поэтому, прежде чем начать анализировать базу по критерию разброса длин пептидных связей, было бы целесообразно исключить все файлы с ровно одной внутренней (не концевой) аминокислотой. Таких файлов оказалось 2 штуки: 3IG6 и 4NL8, и мы исключим их из текущего списка.

Как и раныше, измерим среднее расстояние между С и N двух последовательных аминокислот по всем полипептидам. Оно оказалось равным 1.34. Кроме того, измерим максимальное относительное отклонение от среднего значения для каждого из файлов. "Рекордсмен" — полипептид 1В68, чье относительное отклонение достигает 6500 процентов! В чем же причина таких больших отклонений?

Приведем несколько примеров.

Одной из очевидных причин возникающих отклонений может являться, прежде всего, погрешность в измерениях. Например, по этой причине в полипептиде 3EH0 (см. рис. 10) углерод и азот располагаются очень близко друг к другу.

В следующем примере (файл 1B68) ситуация ровно противоположная — С и N находятся очень далеко, и расстояние между ними отклоняется от среднего значения почти в 5 раз (см. рис. 11), что, скорее всего, не может быть вызвано только погрешностью в измерениях. Естественно возникающее предположение подтвердилось после изучения файла 1B68.pdb: оказывается, в этом файле пропущены аминокислоты с номерами 84 и 85.

Есть также промежуточные примеры, когда, глядя на картинку, не очевидно, какой из двух причин вызвана патология. Посмотрим на пример, приведенный на рис. 12: здесь отклонение от среднего значения составляет 100%.

На сей раз было решено считать отклонение более 22% существенным, что привело к исключению 8333 файлов. Оставшийся список составили 29849 полипептидов.

2.4 Цис и Транс конфигурации пептидных групп

Прежде чем перейти к оценке разброса расстояний между последовательными альфа-углеродами, нужно проанализировать базу на наличие цис- и транс-конфигураций, существование которых приводит к большим отклонениям от средних значений. На сей раз количество полипептидов, содержащих цис-конфигурации, оказалось очень



Рис. 9. Все аминокислоты, в которых максимальное отклонение углов от средних превышает 50%.

Рис. 10. Аминокислоты из полипептида 3EH0: углерод и азот располагаются очень близко друг к другу.



Рис. 11. Аминокислоты из полипептида 1В68: углерод и азот располагаются очень далеко друг от друга (причина пропущены некоторые аминокислоты).

большим, а именно, 13662 файла из 29849 в текущем списке. В основном на каждый такой файл приходится ровно одна подобная конфигурация, о чем свидетельствует следующий список (на первом месте стоит число цис-конфигураций, на втором — количество файлов с таким числом конфигураций):

```
\{1, 7583\}, \{2, 3705\}, \{3, 1638\}, \{4, 467\}, \{5, 107\}, \{6, 49\}, \{7, 19\}, \{8, 72\}, \{9, 5\}, \{10, 4\}, \{11, 2\}, \{12, 4\}, \{13, 3\}, \{16, 2\}, \{19, 1\}, \{22, 1\}.
```

Тем не менее, существует полипептид 2EC5, у которого число цис-конфигураций достигает 22. Приведем, для наглядности, номера пар последовательных аминокислот в этом файле, которые находятся в цис-конфигурации, а также изображения первых четырех из них (см. рис. 13).

2, 3, 188, 240, 241, 242, 244, 245, 246, 247, 318, 320, 321, 402, 403, 404, 405, 432, 455, 457, 555, 561.



Рис. 12. Последовательные аминокислоты в полипептиде 2QKL. Причина отклонения расстояния между С и N не очевидна.



Рис. 13. Четыре примера цис-конфигураций среди пар последовательных аминокислот полипептида 2ЕС5; этот полипептид рекордсмен: в нем имеется 22 цисконфигурации.

После исключения всех полипептидов, содержащих хотя бы одну цис-конфигураци осталось 16187 файлов.

2.5 Оценка разброса длин расстояний между последовательными альфа-углеродами

После исключения всех цис-конфигураций из базы можно приступить к анализу расстояний между последовательными альфа-углеродами. Его среднее значение по всей базе оказалось равным 3.8, а максимальное отклонение от среднего — 32.6%. На рис. 14 приведен график распределения этих отклонений.

Приведем также список точных значений этого графика:

{1134, 8660, 3912, 1409, 580, 241, 109, 57, 35, 14, 11, 8, 5, 3, 3, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1}.

В данном случае очень сложно провести границу, начиная с которой отклонение можно считать существенным, так как распределение убывает более или менее равномерно. Внимательно проанализировав изображения полипептидов, мы выяснили, что отклонения от среднего, превышающие 15 процентов, вполне заметны на глаз. Рассмотрим три примера с такими отклонениями (см. рис. 15 – 17).

Анализ данных показал, что существует 6 полипептидов с отклонениями, превышающими 15%:

1NRF, 1R59, 1SDL, 1URB, 2HWD, 2WOL.

После исключения их из нашего списка остался 16181 полипептид.

2.6 Закон плоскости Полинга

В этой главе будут изложены результаты исследования PDB на наличие отклонений от закона плоскости. По сравнению с ядерно-магнитным резонансом, файлы,



Рис. 14. График распределения максимальных относительных отклонений расстояний между последовательными альфа-углеродами: абсцисса отклонение в процентах, ордината количество файлов.



Рис. 15. Файл 2W0L: пара последовательных аминокислот, для которой отклонение расстояния между альфа-углеродами максимальное, равное 32.62% (альфа-углероды находятся слишком близко друг к другу).



Рис. 16. Файл 2HWD: пара последовательных аминокислот, для которой отклонение расстояния между альфа-углеродами второе по величине, равное 23.06% (альфа-углероды также находятся слишком близко друг к другу).

полученные рентгеноструктурным анализом, не содержат координат водорода. Этс немного упрощает нам задачу, так как в предыдущей статье, помимо обычного закона плоскости для шестерки атомов (CA, C, O и CA, N, H), мы были вынуждены вводить еще и обобщенный закон — для случая с пролином.

Сформулируем закон плоскости в новых терминах: nenmudная группа, состоящая из атомов CA, C, O из *i*-ой аминокислоты и атомов N, CA из (i+1)-ой аминокислоты, лежит в одной плоскости.

Раньше для определения степени плоскости пептидной группы мы пользовались объемом выпуклой оболочки, натянутой на нее. Это вызвало некоторые затруднения, связанные с определением граничных значений, начиная с которых отклонения можно считать существенными. Поэтому было решено модифицировать наш алгоритм и использовать в качестве индикатора плоскости пептидной группы максимум из расстояний от N и CA из (i+1)-ой аминокислоты до плоскости, проходящей через три оставшихся атома (CA, C, O из *i*-ой аминокислоты). Если значение максиму



Рис. 17. Файл 1R59: пара последовательных аминокислот, для которой отклонение расстояния между альфа-углеродами четвертое по величине, равное 22.3% (на сей раз альфа-углероды находятся далеко друг от друга).

ма близко к нулю, то соответствующую пептидную группу можно считать плоской, иначе — нельзя.

Приведем, для сравнения, данные для списка аминокислот без цис-конфигураций и вместе с ними:

- (1) среднее отклонение от закона плоскости в базе только с транс-конфигурациями равно 0.0758039, в полной базе 0.0780234;
- (2) соответствующие минимальные и максимальные отклонения для первой базы — {0.0101321, 2.11352}, для второй — {0.0101321, 2.34802};
- (3) графики распределений для первой и второй баз приведены на рис. 18 и 19 (заметим, что они очень похожи за исключением шкал);
- (4) списки точных значений этих графиков:

{2362, 3744, 2142, 2863, 2623, 1422, 474, 218, 119, 80, 45, 42, 22, 16, 5, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 1} {3329, 6748, 3664, 5005, 5371, 2992, 1246, 552, 286, 193, 127, 133, 89, 51, 29, 14, 7, 4, 4, 0, 2, 1, 1, 1}

(5) изображения пар аминокислот, на которых достигается максимальное отклонение от закона плоскости для базы без цис-конфигураций (рис. 20) и вместе с ними (рис. 21).

Рассмотрим только те полипептиды, у которых отклонение от закона плоскости превышает значения 1.4. Таких файлов оказалось немного, а именно, 12 штук:

1DST, 1EGC, 1GH4, 1HXU, 1Q5T, 2AQX, 2CTS, 2W9Q, 3LY3, 3TPI, 4CTS, 8API.



Рис. 18. Распределение отклонений от закона плоскости для базы без цисконфигураций: абсцисса величина отклонения, ордината количество файлов.



Рис. 19. Распределение отклонений от закона плоскости для полной базы (с цисконфигурациями): абсцисса величина отклонения, ордината количество файлов.

Во время обсуждения со специалистами возникла следующая гипотеза: *наибо*лее существенные отклонения от закона плоскости происходят на парах последовательных аминокислот, располагающихся либо вне участков спиралей и листов, либо на их границах.

Чтобы проверить эту гипотезу мы вычислили для полученных 12 файлов процент отклонений, превышающих 1.4 и попадающих либо на спирали, либо на листы. Численные значения оказались равны 33.3333 и 0 соответственно. Для наглядности мы построили графики отклонений от закона плоскости (абсцисса соответствует номеру



Рис. 20. Пара аминокислот, на которой достигается максимальное отклонение от закона плоскости в базе без цис-конфигураций (файл 1GH4).



Рис. 21. Пара аминокислот, на которой достигается максимальное отклонение от закона плоскости в полной базе, включающей цис-конфигурации (файл 1SIE).

из вышеуказанных 12 полипептидов и отметили на них участки спиралей красным цветом, а листов — синим, см. рис. 22.

Приведем еще немного данных для проверки гипотезы в следующем формате:

```
{
    граничное значение отклонений;
    количество полипептидов с отклонениями, превышающими граничное;
    {процент отклонений, больших граничного и попадающих на спирали,
    процент отклонений, больших граничного и попадающих на листы}
}:
{1; 137; {16.7883, 10.9489}}
{0.9; 222; {13.0631, 10.8108}}
```



Рис. 22. Графики отклонений от закона плоскости для 12 полипептидов, описанных выше, с указанием участков спиралей (красный цвет) и листов (синий цвет).

{0.8;	354; ·	{17.2316,	14.1243}}
{0.7;	585; ·	{20.1709,	14.5299}}
{0.6;	1127;	{20.6744,	20.7631}}
{0.5;	2666;	{21.2303,	29.4449}}
{0.4;	5365;	{29.8788,	43.2992}}

Приведенные нами данные показывают, что выдвинутая гипотеза выполняется плохо даже на больших граничных значениях (более 1).

Проанализировав изображения пар аминокислот с отклонениями, приблизительно равными, соответственно, 0.4 и 0.5, было принято решение в качестве существенного значения отклонения взять 0.5, так как оно все еще заметно на глаз, в отличиє от 0.4 (см. рис. 23 и рис. 24). В результате, мы исключили еще 2666 файлов.

3 Выводы

Таким образом, в данной работе



Рис. 23. Пара последовательных аминокислот с отклонением от закона плоскости, приблизительно равным 0:5: непланарность пептидной группы все еще хорошо заметна.



Рис. 24. Пара последовательных аминокислот с отклонением от закона плоскости, приблизительно равным 0:4: пептидная группа выглядит вполне плоской.

- (1) демонстрируется, что часть Protein Data Bank, полученная с помощью рентгеноструктурного анализа, так же, как и в случае с ядерно-магнитным резонансом, требует существенной чистки и доработки;
- (2) выясняется, что наличие цис-конфигураций не такое уж редкое событие;
- (3) показывается, что нарушение закона плоскости, скорее всего, возникает не из-за неточности измерений, а является одним из реальных феноменов.

Список литературы

- Иванов А.О., Мищенко А.С., Тужилин А.А. Геометрия аминокислот и полиnenmudos. Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2014, 10 (1), 49–76, http://nano-journal.ru [in Russian].
- [2] Pauling L., Corey R.B., and Branson H.R. The structure of proteins; two hydrogenbonded helical configurations of the polypeptide chain. Proc. Natl. Acad. Sci., USA, 1951, 37, 205–211.

GEOMETRY OF AMINO ACIDS AND POLYPEPTIDES: X-RAY CASE

E.A. Vilkul, A.A. Tuzhilin

Lomonosov Moscow State University

tuz@mech.math.msu.su

Received 02.10.2014

The present paper continues testing Protein Data Bank started in [1]: now we are interested in the part of this base which was obtained by means of X-ray analysis. We show that the "pathologies" observed by us in the case of NMR are presented here as well. Moreover, we demonstrate that good resolution (parameter RESOLUTION) does not guarantee the absence of the "pathologies". Finally, we discuss the disturbance of the famous Pauling plane law [2] and show that the high level of disturbance can appear in helixes and sheets.

УСТРАНЕНИЕ УСТОЯВШИХСЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОШИБОК В ТЕРМОДИНАМИКЕ И КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ. НОВАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

В.П. Маслов

МГУ им. М.В. Ломоносова

v.p.maslov@mail.ru

Поступила 10.01.2014

В работе обсуждается следующие вопросы квантовой статистики: 1) отсутствие бозе-конденсата идеального бозе-газа в двумерном и одномерном случае, 2) сосредоточенность бозе-конденсата идеального бозе-газа лишь на одном нижнем уровне спектра оператора Шредингера. В классической статистике обсуждается неувязка понятия идеального газа Больцмана–Максвелла с понятием разреженного насыщенного пара. Возникновение кластеров приводит к полному пересмотру уравнения Клайперона, как уравнения, зависящему от числа степеней свободы. Показывается, что число степеней свободы идеального газа, как правило, дробное. Для нового идеального газа и идеальной виртуальной жидкости описывается фазовый переход 1-го рода при уточнении концепции отрицательного давления для идеальной виртуальной жидкости.

УДК 53:51

1 Введение

Я уже неоднократно писал о различии языков физиков и математиков и о том, как трудно физикам объяснить их недочеты. Переводом с одного языка на другой занимается лингвистика. Для лингвистов, тем не менее, это очень сложная задача.

Опишу свой разговор с одним известным лингвистом, который изучал курс теории множеств. Он мне сказал: «Я всё понял. Не понял только, как это множество может быть пусто? Например, множество мух - как же пусто? Их же множество?» Точно так же физики привыкли к бозе-конденсату и говорят: «А если это фермимолекулы, как же там может быть бозе-конденсат?»

В свое время, когда автор строил асимптотическое разложение решения уравнения Шредингера по степеням малого параметра h (h-константа Планка), один из известнейших ныне физиков ему сказал по поводу асимптотики в окрестности точек поворота, что это не квазиклассика, поскольку там нарушается критерий квазиклассичности Ландау. Автор же, как математик, полагал, что это ограничение искусственное, как искусственные условия в формулировке теоремы, облегчающие доказательство, а асимптотика даже в области глубокой тени и "инстантоны," которые получаются при мнимом значении h, - это квазиклассическая асимптотика.

Недавно акад. Ю.М.Каган очень четко разъяснил автору, что физики под распределением Бозе–Эйнштейна понимают только случай $\mu \leq 0$. Автор же, как математик, полагал, что это ограничение искусственное и рассматривал общий случай без указанного ограничения. Но естественное ограничение $0 \leq N_i \leq N$, следующее из равенства $\sum N_i = N$, существует, и оно должно быть учтено. Конденсат Бозе–Эйнштейна в этом общем случае есть, но не в одной точке, а в малой окрестности нулевого уровня энергии (малой сравнительно с N). Мы не будем называть ниже полученное распределение и явление конденсата бозе-эйнштейновским, чтобы не было ненужных ассоциаций, а будем говорить о "распределениях типа распределения Бозе–Эйнштейна," а математический аналог бозе-конденсата в *классической термодинамике* (т.е. когда константа Планка h равна нулю) называть "конденсатом плотности" в виртуальную жидкость. Мы строим асимптотику в общем случае при $N \gg \ln N$.

2 Ошибки в квантовой статистике

1. В квантовой статистике не учтено, что из равенства

$$\sum_{i=0}^{\infty} N_i = N \tag{1}$$

следует, что $N_i \leq N$.

Это приводит к ошибке, повторяющейся во множестве учебников и статей, которая формулируется следующим образом: в двумерном случае бозе-конденсат возможен только при температуре, равной нулю, т.е. температуре вырождения $T_0 = 0$.

В действительности "температура вырождения" То имеет вид

$$T_0 = \frac{h^2}{\sqrt{2m}} \left(\frac{N}{\mathfrak{S}}\right) \frac{1}{\ln N},\tag{2}$$

где \mathfrak{S} площадь, h - постоянная Планка, m - масса. В двумерном случае $N < 10^{15}$, и пренебрегать величиной 1/15 не следует (см. ниже параграф 6.2, следствие 1; не путать со случаем мезаскопической физики).

2. Вторая обычно повторяющаяся ошибка состоит в том, что квантовый бозе-конденсат возникает на нижнем (нулевом) уровне энергии и, следовательно, не сказывается на общей энергии. Это легко объясняется в дискретном случае из равенств (см. [3])

$$\sum_{i=0}^{\infty} N_i = N, \qquad \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon_i N_i = \mathcal{E}, \tag{3}$$

поскольку если $\varepsilon_0 = 0$, то число N_0 не участвует в определении энергии \mathcal{E} .

Предварительно процитируем определение макроскопического состояния, приведенное в [3, 143].

«Всякое макроскопическое состояние идеального газа можно характеризовать следующим образом. Распределим все квантовые состояния отдельной частицы газа по группам, каждая из которых содержит близкие состояния (обладающие, в частности, близкими энергиями), причем как число состояний в каждой группе, так и число находящихся в них частиц все же очень велики. Перенумеруем эти группы состояний номерами $j = 1, 2, \ldots$, и пусть G_i есть число состояний в j-ой группе, а N_j - число частиц в этих состояниях. Тогда набор чисел N_j будет полностью характеризовать макроскопическое состояние газа».

Однако спектр ε_i сгущается, что непосредственно следует из соотношений для идеального газа (см. [3, §40])

$$\sum_{j=0}^{\infty} N_j = \sum_{j=0}^{\infty} G_j \bar{n}_j = N, \qquad \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon_j N_j = \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon_j G_j \bar{n}_j = E,$$
(4)

$$\frac{\partial}{\partial \bar{n}_j} (S + \alpha N + \beta E) = 0, \tag{5}$$

где \bar{n}_j – среднее число частиц в каждом из G_i состояний *j*-ой группы, α , β – некоторые постоянные (см. [3], сноска на стр.Ё184, а также [1], [2]).

Энтропия S имеет следующий вид

$$S = \sum_{j} \{ (G_j + N_j) \ln(G_j + N_j) - N_j \ln N_j - G_j \ln G_j \},$$
(6)

$$S = \sum_{j} G_{j}[(1 + \bar{n}_{j})\ln(1 + \bar{n}_{j}) - \bar{n}_{j}\ln\bar{n}_{j}].$$
(7)

Заметим, что условие $G_i \to \infty$ фактически используется в работе [3], поскольку для G_i ! применяется формула Стирлинга. Это означает, что спектр сгущается, и поскольку речь идет об асимптотической формуле, то только максимум скопления частиц бозе-конденсата будет в точке i = 0. Чем больше значение i, тем меньше скапливается частиц бозе-конденсата. Тогда бозе-конденсат асимптотически не скажется на значении энергии \mathcal{E} . Заметим, что тот факт, что спектр сгущается, отражен в работе [3] при переходе от сумм к интегралам. В интеграле отделить одну точку нельзя. Можно только отделить ее малую окрестность, если вблизи нее сосредотачивается колоколообразная δ -функция или же в пределе между точкой $\varepsilon_0 = 0$ и $\varepsilon_1 \neq 0$ при переходе от сумм к интегралу образуется щель. Однако можно строго доказать, что для размерности, большей двух, в квантовом распределении Бозе–Эйнштейна щели нет. Следовательно, конденсат образуется в окрестности точки $\varepsilon_0 = 0$ и асимптотически стремится при $N \to \infty$, $G_i \to \infty$ к δ -функции.

Замечание 1. В математической литературе в разных областях математики подобная конструкция приводит к разным терминам, типа "расстояние Кульбака–Лейблера," "ближайшая мартингальная мера" и т.п. (см. [8]). Мы приведем наиболее простую трактовку, связанную с теорией чисел и интегралом Римана. Пусть $\varepsilon_i = i\Delta x$ - собственные значения осциллятора, $\Delta x = h\omega \rightarrow 0$, а G_i - кратность (вырождение) точки спектра ε_i , которая зависит от размерности. Тогда на каждый собственный вектор приходится $\bar{n}_i = N_i/G_i$ "частиц" (это число уже не целое). Если обобщить на дробную (фрактальную) размерность, тогда G_i также будет нецелым. Более того, можно рассматривать также и $G_j = 0$ (дырки). Это значит, что соответствующее собственное значение $\varepsilon_j = j\Delta x$ выпадает.

Для каждого фиксированного x имеем $i\Delta x \to x$ при $\Delta x \to 0, i \to \infty$, т.е.

$$i \sim \frac{x}{\Delta x} \to \frac{x}{h\omega} \to \infty.$$
 (8)

В дальнейшем будем обозначать $h\omega = E_0$.

3 Ошибки в классической статфизике

Одно из устоявшихся ошибочных положений физиков состоит в том, что считается, что число степеней свободы является целым числом, зависящим от числа атомов в молекуле.

Однако исключением из числа физиков, разделяющих эту ошибку, являются академики Л.В.Келдыш и Ю.М.Каган, которые в частной беседе сообщили мне, что число степеней свободы, вообще говоря, дробное и даже необязательно рациональное. Фактически это утверждение неявно содержится в работе [3]. Там указывается, в частности, что колебательные степени свободы зависят от температуры, которая является, как известно, средней энергией.

Скорости молекулы идеального газа разные, следовательно, и энергии у них разные. Из этого следует, что для данной фиксированной температуры, как средней энергии, мы должны рассматривать усредненное число степеней свободы по всем молекулам газа, а это, вообще говоря, не целое число.

Почему же число степеней свободы в старых учебниках по термодинамике считается целым для двухатомных и многоатомных молекул? Дело в том, что если связи (расстояния между атомами этих молекул) очень жесткие, то при повышении температуры новые степени свободы не возникают. Вообще говоря, число степеней свободы в принципе зависит от энергии молекул, а энергия у различных молекул одного и того же газа разная, и, казалось бы, средней энергии – температуре – должно соответствовать среднее, а значит, нецелое число степеней свободы. Но жесткие связи позволяют при достаточно высокой (комнатной) температуре, с одной стороны, возбудить почти все молекулы и, с другой стороны, не дают возможности возбудиться новым степеням свободы (например, колебательным). Если связи не столь жесткие, то число степеней свободы зависит от температуры, а значит, от энергии и, вообще говоря, является нецелым. Это очевидно из сравнения значений теплоемкости C_V с экспериментом: для сероводорода с 3 атомами теория дает 5.96, а эксперимент дает 6.08, для углекислого газа эксперимент дает большее значение $C_V = 6.75$ (T = 15 C,P = 1 атм), для сероуглерода почти вдвое больше: 9.77. В случае двухатомных молекул для азота старая теория дает 4.967, эксперимент показывает 4.93; а для хлора на 20% большее значение: 5.93 и т.д.

Обидно отказываться от такого замечательного совпадения между числом атомов и значениями теплоемкости для большого числа молекул, но к сожалению, именно этот факт связан со спецификой жестких связей между атомами для отдельных молекул. Между тем, есть абсолютная связь между числом степеней свободы и размерностью квантового распределения типа Бозе–Эйнштейна. Эту связь заметили авторы [3], но посчитали это случайным совпадением.

Ландау и Лившиц замечают этот факт для 3-мерного (по импульсам) бозе-газа. Они пишут, что эти равенства ($PV^{5/3} = \text{const}$) совпадают с уравнениями адиабаты для обычного одноатомного газа. «Подчеркнем, однако, - пишут они далее, - что показатели степени в формулах $VT^{3/2} = \text{const}$ и $PV^{5/3} = \text{const}$ не связаны теперь с отношением теплоемкостей (поскольку несправедливы соотношения $c_p/c_v = 5/3$ и $c_p - c_v = 1$)» [3, 187].

Совершенно аналогично можно показать, что для 5-мерного и 6-мерного (по импульсам) бозе-газа "адиабата Пуассона" совпадает с адиабатой Пуассона для 2-атомной и 3-атомной молекулы (см. [3], §47 Двухатомный газ с молекулами из различных атомов. Вращение молекул). Что касается вышеприведенной оговорки, то при $\mu \to -\infty$ (т.е. при переходе к классическому идеальному газу Больцмана–Максвелла) мы получим в точности как условие $c_p - c_v = 1$, так и совпадающее с известными в старой термодинамике соотношение c_p/c_v .

Замечание 2. 3-мерный случай относительно энергии (6-мерный относительно им пульса) распределения Бозе-Эйнштейна можно представить в следующем виде:

$$N_{j} = \sum_{i+k+m=j} N_{i,k,m},$$

$$M = \sum_{i,k,m} (i+k+m)N_{i,k,m} = \sum_{j} \sum_{i+k+m=j} (i+k+m)N_{i,k,m} = \sum_{j} \sum_{i+k+m=j} jN_{i,k,m} = \sum_{j} jN_{j}$$

Бозе-эйнштейновские "средние" значения $\bar{n}_{i,k,m}$ чисел заполнения $N_{i,k,m}$ зависят только от энергии, т.е. от суммы i + k + m, причем

$$\bar{n}_{i,k,m} = \frac{1}{e^{\beta(i+k+m-\mu)} - 1},$$

так что

$$\bar{n}_j = \sum_{i+k+m=j} \bar{n}_{i,k,m} = \frac{q_j}{e^{\beta(i+k+m-\mu)} - 1}, \qquad q_j = \frac{(j+2)!}{j!2}$$

Аналогично происходит переход к целым размерностям; дробные размерности получаются переходом от факториалов к Г-функциям. Строгий математический вывод был получен в замечательной работе А.М.Вершика¹ [4]. См. также работы [5], [6], [7].

В общем случае размерности D относительно энергии

$$q_j = \frac{(j+D-1)!}{j!(D-1)!}.$$
(9)

Для "дробной" размерности D получаем

$$g_j = \frac{\Gamma(j+D)}{\Gamma(j+1)\Gamma(D)}.$$
(10)

¹Эта работа связывает теорию чисел, теорию меры и квантовую статистику и во все эти дисциплины вносит революционный момент.

4 Основная ошибка в классической равновесной термодинамике

Понятие энтропии, следующее из распределения Больцмана, это глубокое и важное понятие в теории информации (по существу, оно же энтропия Шеннона), см. [8]. В статистической физике Гиббс предъявил парадокс, который математики назвали бы контрпримером. Этим контрпримером занимались такие великие математики, как Дж. фон Нейман и А.Пуанкаре.

"Чтобы говорить именно о математической ошибке, которая была в физических учебниках и попала даже в математический словарь, приведу цитату из *Математической* энциклопедии (статья "Больцмана статистика") [9]:

Число различных способов, которыми можно распределить N частиц по M ячейкам размера G_i по N_i частиц в каждой, равно

$$W_{\mathrm{B}}(\ldots N \ldots) = N! \prod_{1 \le i \le M} \frac{G_i^{N_i}}{N_i!}, \quad N = \sum_i N_i,$$

где учитывается, что частицы полностью независимы, различимы и перестановки частиц в пределах каждой ячейки не меняют состояния. В статистике Больцмана эта величина определяет статистический вес или термодинамическую вероятность состояния (в отличие от обычной вероятности она не нормирована на единицу). При подсчете статистического веса учитывается, что перестановка *тождественных частиц* (курсив мой - BM) не меняет состояния и поэтому фазовый объем $W_{\rm B}$ следует уменьшить в N!:

$$W(\ldots N\ldots)=\frac{W_{\rm B}}{N!}.$$

(Зубарев)"

Энтропия Хартли - это логарифм от числа возможных вариантов. Таким образом, новая поправленная энтропия S записывается в виде

$$S = \log W(\dots N \dots) = \log \frac{W_{\rm B}}{N!}.$$
(11)

После применения формулы Стирлинга получаем, что из энтропии Больцмана S_B нужно вычесть член $N \ln N + O(\ln N)$. Непосредственно парадокс Гиббса применительно к такой энтропии уже не имеет места.

Однако энтропия одинаковых шариков, разложенных по ячейкам-ящикам, подсчитана в работе Ландау и Лившица [3] в примечании к §54 (см. также [1]). И для этой энтропии очевидно, что парадокс Гиббса также не имеет места. Априори ясно, что раз энтропия для квантовых частиц и для классических одинаковых шариков оказывается одной и той же, то именно эта последняя (а не (11)) будет квазиклассическим пределом из квантовой статистики Бозе-Эйнштейна. Строгое доказательство этого факта при том, что $h \to 0$, а $N \to \infty$, $G_i \to \infty$, проведено автором [10]. Таким образом, в математической энциклопедии содержится ошибка. Она же повторяется и в физических учебниках и именно из них перекочевала в математический словарь.

Обычно принцип соответствия перехода из квантовой механики в классическую в качестве привычных величин рассматривает классические величины. Но в данном случае, поскольку в классической статфизике рассматривалось распределение с наличием парадокса (контрпримера), то более естественно за привычные принимать квантовые понятия.

Имеет место следующий принцип соответствия:

1) Температуре вырождения в квантовом случае T_0 соответствует в классике критическая температура T_c .

2) Бозе конденсату соответствует конденсат газа (пара) в *виртуальную* жидкость без притяжения, т.е. в плотный несжимаемый идеальный газ, который и ранее рассматривался некоторыми физиками как модель жидкости [11], [12].

Хотя я убежден, что для начинающих (студентов) более естественно отталкиваться от классической термодинамики, в которую в работе [13] я внес поправки.

Фраза относительно "тождественности" классических частиц правильная. Но ее нужно разъяснить.

Неразличимость каких-либо объектов зависит от нашего соглашения. Простейший пример - денежные купюры. На каждой купюре есть номер, но, с точки зрения общепринятого соглашения и даже государственного закона, купюры одного достоинства взаимозаменимы в том смысле, например, что если зарплата гражданина фиксирована в рублях, то в каких купюрах она ему выдана, несущественно. Он не будет судиться с банком или с держателем банкомата за то, что тот выдал ему деньги не в тех купюрах или в купюрах не с теми номерами, в которых ему бы хотелось.

Когда мы говорим о плотности населения, в самом понятии "плотность населения" заложено свойство неразличимости людей ни по половому, ни по возрастному, ни по национальному признакам. Понятие плотности таких-то объектов инвариантно относительно перестановки этих объектов.

С другой стороны, возникает такая постановка вопроса: а если наши глаза, приборы, действительно, недостаточно точные и не могут отличить некоторые объекты друг от друга, то это равносильно вышеуказанному соглашению о неразличимости объектов.

Приведем пример из равновесной термодинамики как некоего процесса.

Если вводить понятие наблюдаемой величины в равновесной термодинамике, то нужно иметь в виду, что само наблюдение должно вестись в дискретные далеко отстоящие друг от друга промежутки времени. Если стоять на чисто математической точке зрения, то процессы установления равновесия требуют бесконечного времени. В математике, впрочем, есть понятия, подобные понятию "периода полураспада" в физике. Например, вводится время, в течение которого разность между текущим состоянием и состоянием равновесия в процессе релаксации уменьшается в *е* раз.

В теории приближения и численных методов, особенно после известной работы Л.И.Мандельштама и М.А.Леонтовича [14], стал использоваться такой процесс релаксации: реагирующую систему первоначально приводят в состояние равновесия. Затем быстро меняют одно из условий (например, температуру или давление) и следят за эволюцией системы в сторону нового равновесия (см., например, статью "среднее время релаксации" в Большой энциклопедии нефти и газа http://www.ngpedia.ru).

Поскольку промежутки наблюдения должны быть "равны" времени релаксации, то они достаточно велики, и такой процесс можно назвать *многошаговым релаксационным процессом* (МРП). Экономические и исторические процессы и биологические процессы в живых организмах также относятся к такого рода явлениям, и поэтому периодически появляются термодинамические модели этих процессов.

Дискретные промежутки времени наблюдения - это первое, что нужно учитывать, когда мы говорим о приборах наблюдения.
Различие показаний макро- и микроприбора в термодинамике заключается в следующих аспектах.

1. Макроприбор не различает движений ядер, электронов и даже атомов внутри молекулы и видит молекулу как отдельную частицу. Математически это соотвествует наложению жестких связей на элементы, из которых состоит молекула.

2. Макроприбор, измеряющий плотность, считает число частиц во фрагменте объема, но в дискретные конечные промежутки времени не может уследить за перемещением частиц с разными номерами. В каждый дискретный момент времени он считает число частиц в единице того же фрагмента, но не в состоянии заметить, какая именно частица, пронумерованная в предыдущий момент времени, на каком именно месте находится и находится ли вообще в фиксированном фрагменте объема. Математически это означает выполнение арифметического закона перестановки слагаемых. Сумма не зависит от того, как мы пронумеровали частицы.

Приведем цитату из учебника [15] по квантовой механике, где авторы определяют основное свойство классической механики: «В классической механике одинаковые частицы (скажем, электроны), несмотря на тождественность их физических свойств, не теряют все же своей "индивидуальности". Именно, можно представить себе частицы, входящие в состав данной физической системы, в некоторый момент времени "перенумерованными" и в дальнейшем следить за движением каждой из них по своей траектории; тогда в любой момент времени частицы можно будет идентифицировать. ... В квантовой механике принципиально не существует никакой возможности следить в отдельности за каждой из одинаковых частиц и тем самым различать их. Можно сказать, что в квантовой механике одинаковые частицы полностью теряют свою "индивидуальность"» (с.252).

Макроприбор это основное свойство также не сохраняет. Математически это означает, что для того, чтобы учесть это свойство прибора, мы должны учесть перестановочность частиц в определении плотности: *от перестановки частиц плотность не меняется*.

В классической термодинамике измеряется плотность молекул газа. Хотя молекулы газа отличаются друг от друга и подход Больцмана к исследованию молекул отвечает объективному миру, однако для определения плотности молекул отличие молекул друг от друга не играет роли. Если рассматривать плотность в маленьком фрагменте объема сосуда, содержащем порядка 1 миллиона частиц, то оказывается, что плотность в этом фрагменте с точностью до тысячи частиц (до 0.1 %) совпадает со средней плотностью в сосуде и не зависит от нумерации частиц.

Микроприбор определяет число атомов, из которых состоит молекула, а отсюда число ее степеней свободы.

Итак, итог:

Распределение для "идеального газа" (т.е. газа без взаимодействий), вообще говоря, отличается от распределения Максвелла для температур, близких к критическим. Оно формально совпадает с распределением Бозе–Эйнштейна.

Для каждого чистого газа, т.е. газа, состоящего из одинаковых молекул из таблицы Менделеева, распределение типа Бозе–Эйнштейна специфично, оно зависит от конструкции данной молекулы - читай: от числа степеней свободы.

Число степеней свободы *D* определяется через значение безразмерного параметра – фактора сжимаемости (не путать с термином "сжимаемость")

$$Z = \frac{PV}{NT} \tag{12}$$

в критической точке T_c , P_c , ρ_c (ρ – плотность) согласно соотношению

$$Z_c = \frac{\zeta(\gamma_c + 2)}{\zeta(\gamma_c + 1)},\tag{13}$$

 $D = \gamma_c + 1, \, \zeta(\cdot)$ – дзета-функция Римана.

Иначе говоря, значение D находится для каждого газа из равенства

$$\zeta(D+1)/\zeta(D) = Z_c. \tag{14}$$

Таким образом, мы используем и макро и микро картину старой доброй термодинамики, но эти картины оказываются не отделенными друг от друга, а тесно связанными: само распределение, которое в старой термодинамике было общим для различных теплоемкостей, теперь связано с теплоемкостями C_V и числом степеней свободы.

Сравнение с экспериментом теоретически вычисленных по предложенной схеме значений для $\{P, V\}$ -диаграммы провели Е.М.Апфельбаум и В.С.Воробьев [16], а для ряда молекул сопоставление с экспериментальными данными провел В.С.Воробьев. Отмечу, что я, как автор этой концепции, не сомневался в совпадении с экспериментальными данными, однако совершенно не ожидал, что получится совпадение и с моделью Ван-дер-Ваальса и с "молекулами Леннарда–Джонса". Это открытие принадлежит В.С.Воробьеву.

Зависимость размерности бозе, ферми и больцмановского идеального газа от числа степеней свободы является обобщением такого красивого факта, как зависимость C_V и C_P от числа атомов в молекуле.

5 Фазовый переход 3-го рода: идеальный газ Больцмана-Максвелла – разреженный насыщенный пар

В работе [3] нестыковка прежде всего заключается в трактовке понятия идеального газа Больцмана–Максвелла. Идеальный газ Больцмана–Максвелла – это, в частности, насыщенный пар [3, §84]. В упомянутой работе про насыщенный пар говорится, как будто это понятие отличается от понятия "газ". Не только студенты, но и некоторые преподаватели термодинамики считают, что пар - это не газ, а вспоминая паровоз, считают, что пар это что-то вроде дыма. «Почему паровоз паром прёт, а баня не прёт?», - вопрос, который задает обыватель в рассказе И.Ф.Горбунова ("Сцены из народного быта", 1861), глубоко укоренился.

В [3, 314-315] говорится: «Рассматривая пар как идеальный газ, выразим его объем через давление и температуру согласно формуле $v_2 = T/P$ ».

В математике, если мы вводим какое-то понятие, то потом добавлять в него новые свойства, как бы между прочим, не полагается. Если это модель идеального газа, то несмотря на промежуток в книге [3] в 40 параграфов, модель должна оставаться той же самой. Пар-газ остался разреженным, как и был при комнатной температуре и давлении в 1 атм. Переход "идеальный газ–насыщенный пар" это, что, фазовый переход? Если так, то его нужно предъявить. Известно утверждение: "жидкость не может существовать без притяжения". Как известно, притяжение - это чисто квантовый эффект, в котором не малую роль играет обменное взаимодействие, исчезающее в классическом пределе.

Молекула тоже не может существовать без притяжения. Идеальный газ не может существовать без молекул. Следовательно, ... Но не будем продолжать, потому что идеальный газ – газ без притяжения – это замечательная модель.

Переход в бозе-конденсат в квантовой статистике – это фазовый переход 3-го рода. Возникновение конденсата плотности при температуре "бинодали" (ее называют также "точкой росы," хотя "роса" - капля еще не достигла критического радиуса) – это классический аналог квантового бозе-кондесата, а значит, фазовый переход "идеальный газ – насыщенный пар" – это фазовый переход 3-го рода. Но при этом фазовом переходе насыщенный пар остается старым идеальным газом Больцмана–Максвелла.

В силу вышеуказанного принципа соответствия, появляется "покоящаяся" флуктуация плотности как аналог покоящегося бозе-конденсата. Эта флуктуация покоится лишь в том смысле, как покоится плотность металлической пыли столь большой хаотической скорости над магнитом, что пыль не оседает на магнит, но создает вблизи него большую "покоящуюся" плотность, которая может давать густую тень. Тень стоит на месте, а пылинки движутся. Однако эта плотность является *пусковым механизмом* включения квантовых сил притяжения и в результате образуется флуктуация капли, а затем при уменьшении температуры и достижения радиуса капли критического радиуса образуется и реальная капля.

Однако сама природа не дает нам ликвидировать исходную математическую модель идеального газа. Дело в том, что нарушается закон равновесия "газ–жидкость," поскольку давление в капле больше давления насыщенного пара. Если мы хотим остаться в рамках исходной математической модели перехода газ-жидкость, то должны рассматривать жидкость без поверхностного натяжения, а значит, без притяжения. К счастью для автора, некоторые физики рассматривают модель жидкости как модель плотного газа [11], [12], и значит, автор не совсем одинок в опровержении постулата, что жидкость не бывает без притяжения.

Таким образом, можно считать, что между температурой бинодали и температурой образования капли критического радиуса образуется флуктуация плотности. Если рассматривается сосуд в форме шара и присутствует земное притяжение, то вблизи точки дна шара будет образовываться виртуальная жидкость. При этом, если произвести мечение нескольких молекул, запустив малое число изотопов, за которыми можно следить, то они будут свободно проходить через виртуальную жидкость в пар и обратно и образовывать более плотную структуру вблизи дна шара настолько, что при освещении параллельными лучами она будет давать тень. Однако вытащить эту каплю из газовой среды невозможно. Виртуальную жидкость можно видеть, но нельзя осязать. Она будет давать тень, но выпить ее будет невозможно. В этом смысле я согласен с утверждением, что "жидкость без притяжения – это не жидкость, а жульнический обман зрения."

Если пытаться продать ее в качестве жидкости, как это делает автор, то получишь, согласно Понургу, только звон монет, а не сами монеты, и боюсь, что этот звон повредит репутации автора. Автор оказывается здесь в роли мальчика, который сказал: «А король-то голый!» К сожалению, Андерсен не написал, что стало с этим мальчиком, и поэтому автору придется дописать эту сказку.

Такой фазовый переход 3-го рода, по крайней мере для метана (CH_4) и тетрафторметана (CF_4) , на эксперименте (А.Е.Гехман, В.В.Бражкин) происходит за счет увеличивающейся при уменьшении температуры ассоциации части молекул в димеры, тримеры и другие кластеры.

Димер, с одной стороны, образуется в силу наличия притяжения между молекулами. Однако живет недолго 10^{-5} сек. (разбивается мономером). Для наблюдателя, наблюдающего за газом в большие промежутки времени, он является виртуальным, как виртуальная жидкость, - наблюдатель может отметить лишь процент димеров в газе. Как показано в [17], статистически это явление отвечает разбросанному по сосуду конденсату плотности. Увеличение плотности димеров сопровождает флуктуации плотности как виртуальной жидкости.

Как флуктуация виртуальной плотности приходит на помощь условиям возникновения квантового притяжения, так и рассеянная по сосуду виртуальная плотность является пусковым механизмом включения квантовых сил притяжения для образования димера. Виртуальная жидкость - это модель, и она достаточно точно описывает ситуацию сосуществования системы газ-"жидкость".

В старой модели идеального газа Больцмана-Максвелла условие идеальности Клаузиуса

$$Z = \frac{PV}{NT} = 1$$

не связано с числом степеней свободы D молекулы. В получающейся из свойства "тождественности" частиц, процитированного выше из Математической энциклопедии, концепции оно связывается некоторым соотношением (вблизи критической точки соотношением (13)). Переход "газ-насыщенный пар" гладко изменяет число степеней свободы из-за появления процента димеров и других кластеров. Очевидно, что в старой формуле Клаузиуса меняется число частиц N, поскольку при подсчете с помощью приборов, существовавших в те времена, молекулы и димеры не различались.

Но, как говорилось, образование молекулы из атомов также возникает в результате квантовых взаимодействий. Это не противоречит концепции классического идеального газа Больцмана-Максвелла при учете числа степеней свободы, зависящего от числа атомов в молекуле. Четкое отделение асимптотического предела по малому параметру h плюс достаточная разреженность является одним из важнейших инструментов в современной статистической физике. Мы избаляемся в работе [13] от дополнительного условия разреженности, заменяя его связью фактора сжимаемости Z с числом степеней свободы.

6 Дырки в виртуальной жидкости и отрицательное давление

По существу переход к интегралу

$$\Omega(\mu, T) = (Cm)^{1+\gamma} V \frac{T^{2+\gamma}}{\Gamma(2+\gamma)} \int_0^\infty \frac{t^{1+\gamma} dt}{(e^t/a) - 1} = -T^{2+\gamma} (Cm)^{1+\gamma} V \operatorname{Li}_{2+\gamma}(a), \qquad (15)$$

где T - температура, m -масса, C - константа, $a = \exp(\mu/T)$ - активность, μ - химический потенциал, Γ – гамма функция, от интеграла по импульсам в [3] заменой $p^2/2m = \varepsilon$ соответствует переходу к энергетическому осцилляторному "представлению" [18] или, что то же самое, к натуральному ряду. Мера $d\varepsilon$ в этом случае отвечает дискретным разбиениям одинакового шага, т.е. натурального ряда, умноженного на малый параметр². Исторически такое представление присутствовало уже в исходном распределении Планка. Переход от такого дискретного представления натурального ряда к интегральному представлению будет описан в этом разделе. Это представление связывает распределение Бозе-Эйнштейна с теорией чисел, рассмотренной в примере 1 работы [13]. С другой стороны, оно подчеркивает зависимость дискретного распределения Бозе-Эйнштейна-Планка только от числа степеней свободы и независимость его от 3-мерного объема V.

Очевидно, что дискретные разбиения, приводящие к интегралу (15) неоднозначны. Обычно физики приводят дискретные разбиения к интегралу по импульсам, пытаясь увязать их с объемом V (и соответственно с фазовым объемом). Приходя к натуральному ряду $\varepsilon_i = E_0 i$ и параметру γ , мы подчеркиваем разницу в этих подходах.

Итак, наша процедура перехода к отрицательным значениям γ состоит в том, что мы сначала переходим, аналогично работе [3], к интегралам по импульсам, а затем после замены $p^2/2m = \varepsilon$, опять аналогично [3], к интегралам по энергии ε . После этого интеграл по энергии апроксимируем интегральной суммой с учетом того, что число N конечно³.

Далее, как говорилось выше, необходимо брать "вариационную производную по набору \bar{n}_i " в (4), (5), (7). Проще воспользоваться следующим соображением.

Определим, как обычно, свободную энергию рассмотренного идеального газа как

$$\min_{\bar{n}} \left\{ \sum N_i \varepsilon_i - \theta \ln \Gamma_{\{N_j\}\{G_i\}} \right\},\tag{16}$$

где θ - температура, а $S = \ln \Gamma_{\{N_j\}\{G_i\}}$ - энтропия, (см. (4)–(7)). Тем самым мы получим распределение нового идеального газа в случае конечного числа частиц N.

Имеем [25] согласно (10)

$$\Gamma(1+x) = \sqrt{2\pi} x^{x+\frac{1}{2}} e^{-x+\frac{1}{12(x+\theta)}}, \qquad 0 < \theta < \frac{1}{2}.$$
(17)

$$\Gamma(1+x+\gamma) = \sqrt{2\pi}(x+\gamma)^{x+\gamma+\frac{1}{2}}e^{-x-\gamma+\frac{1}{12(x+\gamma+\theta)}}, \qquad 0 < \theta < \frac{1}{2}.$$
 (18)

$$\left(\frac{x+\gamma}{x}\right)^x (x+\gamma)^{\gamma} e^{-\gamma} + o(\frac{1}{x}),$$
$$\left(1+\frac{\gamma}{x}\right)^x \to_{x\to\infty} e^{\gamma},$$
$$(x+\gamma)^{\gamma} = x^{\gamma} + o(\frac{1}{x}).$$

Отсюда

$$g_i = \frac{\Gamma(1+i+\gamma)}{\Gamma(1+i)\Gamma(\gamma+1)} = i^{\gamma} + O(\frac{1}{i}), \qquad D = \gamma + 1$$
(19)

(см. (9)).

 $^{^{2}}$ Математически мы переходим от "меры" к весу с помощью производной Радона-Никодима. 3 Согласно теореме Родона-Никодима эту процедуру можно упростить, точнее сократить.

Построим термодинамику типа идеального Бозе-газа с ограниченным числом состояний на данном квантовом уровне. Поскольку в силу левого равенства формулы (4) имеем $N_i \leq N$, то это условие не является дополнительным ограничением. Суммируя конечную геометрическую прогрессию, получаем

$$\Omega_i(N) = \frac{-T}{\Lambda^{2(1+\gamma)}} \ln \sum_{n=0}^N \tilde{g}_i \left(\exp\left(\frac{\mu - E_0 i}{T}\right) \right)^n = \frac{1}{\Lambda^{2(1+\gamma)}} \ln \tilde{g}_i \left(\frac{1 - \exp\left(\frac{\mu - E_0 i}{T}\right) \left(N + 1\right)}{1 - \exp\left(\frac{\mu - E_0 i}{T}\right)} \right),\tag{20}$$

где $\tilde{g}_i = ig_i = i^{\gamma+1}, \, \Lambda = 1/Cm.$

Потенциал Ω равен сумме Ω_i по *i*:

$$\Omega = \sum \Omega_i. \tag{21}$$

При предельном переходе (9) к интегралу Римана из (16) получаем, что вариационная производная свободной энергии по $\{\tilde{n}_i\}$ равна нулю. Строго говоря, в равенстве (5) символ $\frac{\partial}{\partial \bar{n}_i}$ нужно понимать также в смысле вариационной производной.

6.1 Зависимость E_0 от N

Итак, в предположении, что при $T_r = 1$ переход в виртуальную жидкую фазу не осуществляется, мы приравниваем химпотенциалы μ и $\tilde{\mu}$ для виртуальной "жидкой" и "тазовой" фазы на изотерме $T_r = 1$.

Затем мы находим точку μ – точку перехода в виртуальную "жидкую" фазу при $T_r < 1$, приравнивая химпотенциалы виртуальной "жидкой" и "газовой" фазы.

Замечание 3. Рассмотрим случай $\gamma < 0$ и $\tilde{\mu} = 0$. Введем обозначение

$$F(\xi) = \left(\frac{1}{\xi} - \frac{1}{e^{\xi} - 1}\right).$$

При $\gamma < 0$ и $\tilde{\mu} = 0$ имеем

$$N_c = \Lambda^{\gamma - \gamma_c} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j^{\gamma}}{e^{bj} - 1} = \Lambda^{\gamma - \gamma_c} \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} j^{\gamma} \frac{1}{bj} - \sum_{j=1}^{\infty} j^{\gamma} F(bj) \right\}, \qquad b = \frac{E_0}{T}.$$
 (22)

Поскольку функция $f(x) = x^{\gamma} F(bx)$ монотонно убывает, то

$$\sum_{j=1}^{\infty} j^{\gamma} F(bj) = \sum_{j=1}^{\infty} f(j) \le \int_0^{\infty} f(x) \, dx = \int_0^{\infty} x^{\gamma} F(bx) \, dx = b^{-\gamma - 1} \int_0^{\infty} x^{\gamma} F(x) \, dx \quad (23)$$

(неравенство Назайкинского).

Таким образом,

$$N|_{\tilde{\mu}=0} = \Lambda^{\gamma-\gamma_c} b^{-1} \zeta(1-\gamma) + O(b^{-1-\gamma}), \qquad \gamma < 0,$$
(24)

где ζ – дзета функция Римана.

В настоящем параграфе мы найдем точку изотермы-изобары виртуальной жидкости при медленном стремлении величины $\varkappa = -\mu/T$ к нулю.

Итак, мы учтем, что N_c хотя и велико, но конечно, и следовательно, нужно использовать парастатистическую поправку. Напомним соотношение

$$\Omega = -\Lambda^{\gamma - \gamma_c} T \sum_k \ln k^{\gamma + 1} \left(\frac{1 - \exp \frac{\mu - \varepsilon_k}{T} N}{1 - \exp \frac{\mu - \varepsilon_k}{T}} \right), \qquad \varepsilon_k = E_0 k, \tag{25}$$

для Ω-потенциала.

Регуляризация расходящихся при $x \to \infty$ интегралов делается, например. с помощью сходимости по Чезаро при изменении порядка перехода к пределу. Когда рассматривается задача об асимптотическом разложении по малому параметру (например, по $\varepsilon = 1/N, N \to \infty$), то регуляризация может проводиться с учетом оценок этого разложения.

В нашем случае сумма $\sum G_i$ при уменьшении расстояния между значениями i-1, i, i+1 имеет особенность при малых i (т.е. в пределе интеграла - в нуле), а также при $G_i \to \infty$ на бесконечности. Поэтому естественной регуляризацией является фотонный вес $\frac{1}{e^{bj}-1}$, поскольку он одновременно регуляризует $\sum_i G_i$ и при малых i и при $i \to \infty$.

Регуляризуя $\sum G_i$ фотонным статистическим весом $\frac{1}{e^{b_j}-1}$, получаем

$$\sum \frac{G_i}{e^{bj}-1} = N\Lambda^{\gamma_c-\gamma}.$$

Положив

$$E_0 = \frac{T_c}{N} \zeta(1-\gamma) \Lambda^{\gamma-\gamma_c}, \qquad -1 < \gamma < 0$$

 $(E_0 \to 0 \text{ as } N \to \infty)$, мы получаем

$$\frac{\Lambda^{\gamma - \gamma_c} \sum (G_i) / (e^{bj} - 1)}{\sum N_i} = \rho = 1.$$

Для числа частиц имеем формулу $N = -\partial \Omega / \partial \mu$. Опуская объем V, получим⁴

$$N = \frac{1}{\Lambda^{2(1+\gamma)}} \sum_{i} \left(\frac{i^{\gamma}}{\exp\left(-\frac{\mu}{T} + \frac{E_{0}i}{T}\right) - 1} - \frac{(N+1)i^{\gamma}}{\exp\left[(N+1)\left(-\frac{\mu}{T} + \frac{E_{0}i}{T}\right)\right] - 1} \right).$$
(26)

Объем V в соотношениях (20)-(21) был необходим только ради нормировки - перехода от числа N к плотности. При $\gamma > 0$ он не мешает асимптотике $N \to \infty$, поскольку член, содержащий в правой части величину N + 1, мал. Вместе с тем он согласуется с давлением, поскольку $P = -\partial \Omega / \partial V$. При $\gamma \leq 0$ мы опускаем объем V.

6.2 Оценки при переходе к интегралам

Учитывая параметр γ , мы используем формулу Эйлера-Маклорена и получаем

$$\sum_{j} \left(\frac{j^{\gamma}}{e^{bj+\varkappa} - 1} - \frac{kj^{\gamma}}{e^{bkj+k\varkappa}} \right) = \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{bx+\varkappa} - 1} - \frac{k}{e^{bkx+k\varkappa} - 1} \right) dx^{\alpha} + R,$$

где $\alpha = \gamma + 1, \, k = N + 1, \, b = 1/T$ и $\varkappa = -\mu/T$. Здесь остаток R удовлетворяет оценке

$$|R| \le \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty |f'(x)| \, dx^{\alpha}, \qquad \text{где} \quad f(x) = \frac{1}{e^{bx+\varkappa} - 1} - \frac{k}{e^{k(bx+\varkappa)} - 1}.$$

⁴Математически строго уменьшение на единицу степени g_i следует непосредственно из (4), поскольку уровни "энергии" ε_i в нашем случае равны $E_0 i$. После взятия производной по μ степень Tуменьшается на единицу.

Вычисляем производную и получаем

$$f'(x) = \frac{bk^2 e^{k(bx+\varkappa)}}{(e^{k(bx+\varkappa)} - 1)^2} - \frac{be^{bx+\varkappa}}{(e^{bx+\varkappa} - 1)^2},$$

$$|R| \le \frac{1}{\alpha b^{\alpha}} \int_0^\infty \left| \frac{k^2 e^{k(y+\varkappa)}}{(e^{k(y+\varkappa)} - 1)^2} - \frac{e^{y+\varkappa}}{(e^{y+\varkappa} - 1)^2} \right| dy^{\alpha}.$$
(27)

Имеем также

 $\frac{e^z}{(e^z-1)^2} = \frac{1}{z^2} + \psi(z),$ где $\psi(z)$ гладкая функция и $|\psi(z)| \le C(1+|z|)^{-2}.$

Полагая z = y и z = ky, мы получаем оценку для R

$$|R| \leq \frac{1}{\alpha b^{\alpha}} \int_{0}^{\infty} \left| \psi \left(k(y + \varkappa) \right) - \psi(y + \varkappa) \right| dy^{\alpha}$$
$$\leq \frac{k^{-\alpha}}{b^{\alpha}} \int_{k\varkappa}^{\infty} \left| \psi(y) \right| dy^{\alpha} + \frac{1}{b^{\alpha}} \int_{\varkappa}^{\infty} \left| \psi(y) \right| dy \leq Cb^{-\alpha}$$
(28)

с некоторой константой C. Например, если $\varkappa \sim (\ln k)^{-1/4}$, то |R| сохраняет оценку $|R| \sim O(b^{-\alpha})$.

Энергию будем обозначать буквой M, поскольку без умножения на объем V это не совсем привычная термодинамика, а скорее, некоторый аналог теории чисел (см. пример 1 работы [13]).

Учитывая, что для значения М поправкой в (20) можно пренебречь, получаем

$$M = \frac{\Lambda^{\gamma_c - \gamma}}{\alpha \Gamma(\gamma + 2)} \int \frac{\xi \, d\xi^{\alpha}}{e^{b\xi} - 1} = \frac{\Lambda^{\gamma_c - \gamma}}{b^{1+\alpha}} \int_0^\infty \frac{\eta d\eta^{\alpha}}{e^{\eta} - 1},\tag{29}$$

где $\alpha = \gamma + 1, \, b = 1/T_r$. Следовательно,

$$b = \frac{1}{M^{1/(1+\alpha)}} \left(\frac{\Lambda^{\gamma_c - \gamma}}{\alpha \Gamma(\gamma + 2)} \int_0^\infty \frac{\xi \, d\xi^\alpha}{e^{\xi} - 1} \right)^{1/(1+\alpha)}$$

Получаем (см. [19])

$$\begin{split} &\sum_{j} \left(\frac{j^{\gamma}}{e^{bj+\varkappa}-1} - \frac{kj^{\gamma}}{e^{bkj+k\varkappa}} \right) = \frac{1}{\alpha} \int_{0}^{\infty} \left\{ \frac{1}{e^{b\xi}-1} - \frac{k}{e^{kb\xi}-1} \right\} \, d\xi^{\alpha} + O(b^{-\alpha}) \\ &= \frac{1}{\alpha b^{\alpha}} \int_{0}^{\infty} \left(\frac{1}{e^{\xi}-1} - \frac{1}{\xi} \right) \, d\xi^{\alpha} + \frac{1}{\alpha b^{\alpha}} \int_{0}^{\infty} \left(\frac{1}{\xi} - \frac{1}{\xi(1+(k/2)\xi)} \right) \, d\xi^{\alpha} \\ &- \frac{k^{1-\alpha}}{\alpha b^{\alpha}} \int_{0}^{\infty} \left\{ \frac{k^{\alpha}}{e^{k\xi}-1} - \frac{k^{\alpha}}{k\xi(1+(k/2)\xi)} \right\} \, d\xi^{\alpha} + O(b^{-\alpha}) \\ &= -\frac{c(\gamma)}{b^{\alpha}} (k^{1-\alpha}-1) + O(b^{-\alpha}). \end{split}$$

Положив $k = N|_{\tilde{\mu}/T=0} \gg 1$, получаем окончательно

$$N|_{\tilde{\mu}/T=0} \cong (\Lambda^{\gamma_c - \gamma} c(\gamma))^{1/(1+\gamma)} T_r, \quad \text{где} \quad c(\gamma) = \int_0^\infty \left(\frac{1}{\xi} - \frac{1}{e^{\xi} - 1}\right) \xi^{\gamma} d\xi.$$
(30)

Следствие 1 (Формула Эрдёша). *Мы получили, что* $\varkappa \to 0$ *дает число* N *с точностью до* $O(b^{-1})$. *Таким образом,*

$$N_c = \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{bx} - 1} - \frac{N_c}{e^{bN_cx} - 1}\right) dx + O(b^{-1}).$$

Рассмотрим значение интеграла (с тем же подынтегральным выражением), взятого от ε до ∞ , а затем перейдем к пределу при $\varepsilon \to 0$.

После замены $bx = \xi$ в первом члене и $bN_c x = \xi$ во втором члене получим

$$N_{c} = \frac{1}{b} \int_{\varepsilon b}^{\infty} \frac{d\xi}{e^{\xi} - 1} - \int_{\varepsilon b N_{c}}^{\infty} \frac{d\xi}{e^{\xi} - 1} + O(b^{-1}) = \frac{1}{b} \int_{\varepsilon b}^{\varepsilon b N_{c}} \frac{d\xi}{e^{\xi} - 1} + O(b^{-1})$$
(31)

$$\sim \frac{1}{b} \int_{\varepsilon b}^{\varepsilon b N_c} \frac{d\xi}{\xi} + O(b^{-1}) = \frac{1}{b} \{ \ln(\varepsilon b N_c) - \ln(\varepsilon b) \} + O(b^{-1}) = \frac{1}{b} \ln N_c + O(b^{-1}).$$
(32)

С другой стороны, произведя замену $bx = \xi$ в уравнении (29), мы получаем

$$\frac{1}{b^2} \int_0^\infty \frac{\xi \, d\xi}{e^{\xi} - 1} \cong M.$$

Это дает

$$b = \left(\sqrt{M} / \sqrt{\int_0^\infty \frac{\xi \, d\xi}{e^{\xi} - 1}}\right)^{-1}, \qquad N_c = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{\pi^2/6}} \ln M(1 + o(1)) + O(b^{-1}). \tag{33}$$

Теперь найдем следующий член асимптотики, положив

$$N_c = c^{-1} M^{1/2} \ln c^{-1} M^{1/2} + \alpha M^{1/2} + o(M^{1/2}), \qquad \text{где} \quad c = \frac{2\pi}{\sqrt{6}}.$$
 (34)

Кроме того, подставляя выражение для N_c вида

$$N_c = c^{-1} M^{1/2} \ln N_c + O(b^{-1})$$

в логарифм $\ln N_c$, получаем для второго приближения

$$\alpha = -2\ln\frac{c}{2}.$$

Тем самым мы получаем формулу Эрдёша (34); см. [20].

Соотношение $N = T_r^{\gamma_c+1}\zeta(\gamma_c+1)$ сопрягается с линейным соотношением $N = A(\gamma)T_r$, где $A(\gamma) = (\Lambda^{\gamma_c-\gamma}c(\gamma))^{1/(1+\gamma)}$, при $P_r < 0$.

Мы можем произвести нормировку активности a в точке T_c и можем найти a_0 , сопрягая жидкую и газовую ветку при T_c для давления $P_r = 1$, чтобы фазового перехода на критической изотерме при $T_r = 1$ не было.

6.3 Дырки в бозе-конденсате как наблюдаемые величины. Максимальная плотность дырок

Молекулы идеального газа можно представить себе как крохотные шарики. Представим себе дырки, экситоны в стекле так же, как шарики, но пустые без вещества - молекулы. Очевидно, что если перемешать в стекле такие шарики хаотическим образом, то хаос в стекле еще увеличится. А это значит, что при наличии дырок энтропия увеличится. Поэтому чтобы достичь максимума энтропии, надо еще "намешать" туда дырок.

В нашей концепции дырки возникают при $\gamma < 0.$

В модели идеального газа мы игнорируем притяжение, а это значит, что при "растяжении" жидкости, приводящем к дыркам, жидкость не сопротивляется (как песок на сжатие - он несжимаем, а на "растяжение" не сопротивляется; ср. аппендикс в книге [22]).

Раз нет притяжения, то нет и отрицательного давления при "растяжении", т.е. образования дырок. Если $\gamma < 0$, то плоскость (Z, P) снова положительна, а значит, покрывается другим листом. Нетрудно убедиться, что прямые, проходящие в точку Z = 0, P = 0 (т.е.в точку $\gamma = 0$), отражаются на этом втором листе обратно по той же прямой. Это значит, что геометрически удобно устроить отражение векторов на втором листе с помощью матрицы -I, где I – двумерная единичная матрица, т.е. зеркально отразить лист $\gamma < 0$ в отрицательный квадрант.

Отметим, что эта процедура сооветствует концепции дырок Дирака, только наоборот – дыркам мы ставим в соответствие отрицательное давление, т.е. отрицательную энергию. Теперь прямые будут продолжаться через точку начала координат в отрицательный квадрант, хотя давление реально не меняет знак. Это лишь удобная геометрическая "униформизация".

Отметим также, что ввиду отсутствия притяжения виртуальная жидкость полностью пластична: она не стремится возвратиться в исходное (до растяжения) состояние. В этом смысле бозе–конденсат при $\gamma < 0$, приводящий к этому "виду" жидкости, также более наглядно может быть воспринят как стекло или аморфное тело ⁵. Это состояние жидкости при $\gamma < 0$ более наглядно.

Замечание 4. Автор пришел к пересмотру термодинамики от экономики, в которой деньги – это частицы согласно принципу соответствия, выведенному Ирвингом Фишером. Фишер сам не назвал свое наблюдение принципом соответствия. Но поскольку он был учеником Гиббса, то соотношение основного закона экономики

$$PQ = Mv, (35)$$

где Q – объем товаров, M – число денег, v – скорость оборота, а P – цена товаров, очевидным образом связано с соответствием экономических и термодинамических величин: объём V – объём товаров Q, число денег M – число частиц N, скорость v – температура T. Цена товаров P не в такой степени связана с давлением, зато обозначается той же буквой.

В этом принципе соответствия естественно сопоставить дырки долгам, погашение долгов – аннигиляции.

Как было сказано выше, геометрическое место точек, в котором химпотенциал равен нулю, это точки максимальной энтропии. Мы их назвали "новой спинодалью".

⁵Физики знают, что стекло – это жидкость, а аморфный металл – это стекло. Следовательно, аморфный металл – это жидкость. Возможно, экситоны - дырки в аморфных металлах и стеклах (void) будут легче восприниматься читателем, чем дырки в жидкости, посколько для металла кристаллического это понятие достаточно привычно. Гирер и Вирц считают, что образование дырок может быть описано как разрыв "связей" между двумя соседними молекулами (аналогично диссоциации двухатомной молекулы).

В экономике эта новая спинодаль означает некий предел долгов [19], [23].

Итак, согласно полученным соотношениям мы получаем двулистное покрытие плоскости $\{Z, P\}$ при $\gamma \ge 0$ и $-1 \le \gamma < 0$. Смысл второго листа заключается в том, что при $-1 \le \gamma < 0$ хаотическое состояние жидкости, как явления, связанного с бозе-конденсатом, увеличивается, когда число дырок типа экситонов Френкеля увеличивается, располагаясь в жидкости, как флуктуационно сосредоточенной на сравнительно малоподвижной, с точки зрения вышеуказанного прибора⁶, области возникает хаотические нанодырки – структура жидкости хаотически растягивается.

Дырки-экситоны при этом не могут быть пронумерованы нашим прибором так, чтобы уследить за номерами в дискретные моменты времени шагового процесса. Мы можем говорить лишь о плотности дырок. Этот второй лист для удобства, как говорилось выше, лучше расположить в квадранте [-Z, -P], продолжая прямые за особую точку Z = 0, P = 0 в отрицательный квадрант. Иначе говоря, совершить отражение с помощью матрицы -I, где I – единичная матрица.

Тем самым оказывается удобно говорить об "отрицательном давлении", хотя притяжением частиц мы пренебрегаем и значит, никакого отрицательного давления быть не может. Давление, как и температура, обычно считаются положительными. Мы растягиваем жидкость, а она пластически застывает в этом растянутом состоянии и не стремится сжаться обратно.

Объясним с точки зрения физики, почему естественно продолжить на отрицательный квадрант. Мы сравниваем виртуальную жидкость с мелким песком (пылинками), который "на сжатие" несжимаем, а на растяжение "не сопротивляется," поскольку между пылинками нет притяжения. Для этого рассмотрим пример.

Пример 1. Рассмотрим цилиндрический сосуд, наполненный песком, крышка которого прикреплена к поршню, в помещении космической станции. Увеличение объема сосуда с помощью поршня приводит лишь к перегруппировке песка и превращению его в "плавающую пыль" в новом объеме (при учете теплового движения и столкновения– отталкивания песчаных пылинок; ср. [24]).

Если принять во внимание гравитационное притяжение между песчинками, то оттягивание поршня – есть отрицательное давление, и значит, естественно перейти к отрицательному квадранту на (P, Z) диаграмме, а затем пренебречь гравитационным притяжением.

Пренебрежение наличием притяжения здесь столь же "законно", как в теории равновесия пар–жидкость, где условие равенства давлений возможно лишь при пренебрежении поверхностным натяжением, т.е. при рассмотрении виртуальной жидкости.

7 Новое термодинамическое распределение и парастатистики

"Закон экономической выгодности"заключается в том, что при той же температуре $T_r < 1$, меньшей T_c , частицы газа стремятся увеличить число степеней свободы с исходного $\gamma = \gamma_0$ вплоть до $\gamma(T_r)$, критического для данного T_r .

⁶В реальности они могут быстро и незаметно для глаз и прибора меняться между собой и окружающим газом.

Это предпочтение в экономике означает предпочтение объединения перед взятием в долг. В термодинамике это означает предпочтение объединения в кластеры перед переходом в жидкое состояние.

Нетрудно показать, что поправка к распределению Бозе-Эйнштейна, связанная с эти законом, улучшает совпадение с изотермами по уравнению Ван-дер-Ваальса, настолько, что на графике они практически неразличимы.

Геометрическое место точек, в которых происходит переход "газ-жидкость", называется бинодалью. Геометрическое место точек, в которых касательная к изотерме перпендикулярна оси P на Z, P диаграмме, называется спинодалью.

Пусть γ_0 отвечает критической изотерме для данного газа, т.е.

$$Z = \frac{P_c V_c}{N_c T_c} = \frac{\zeta(\gamma_c + 2)}{\zeta(\gamma_c + 1)}.$$

Точка T_{tr} , которая лежит на бинодали и в которой одновременно могут существовать три фазы: жидкая, газообразная и твердая, называется тройной точкой. Таким образом, эта точка определяется на бинодали, и изотермы при температуре ниже этой точки экспериментально не наблюдаются.

На графике 1 изображена часть рисунка 8 из работы [21].

Хорошее согласование с последними экспериментальными значениями для азота имеет место для изотерм от Z = 1.0 вплоть до точки (Z = 0.29, P = 1). Спинодаль – нижняя жирная линия следует из эмпирической модели авторов работы [21].

Определим адиабату Пуассона для дробной размерности. Для этого рассмотрим предельный случай $a \to 0$, т.е. случай старого идеального газа. Имеем

$$Li_{\gamma+2}(a) = a + \frac{a^2}{2^{2+\gamma}} + O(a^3),$$

$$Li_{\gamma+1}(a) = a + \frac{a^2}{2^{1+\gamma}} + O(a^3).$$
(36)



Рис. 1: Верхняя жирная линия – бинодаль, нижняя – спинодаль. Тонкие линии – изотермы. $T_r = \frac{T}{T_r}$.

$$Z(a) = \frac{1 + a/2^{\gamma+2}}{1 + a/2^{\gamma+1}} = 1 - \frac{a}{2^{\gamma+2}}.$$
(37)

На (Z, P_r) -диаграмме, на которой $P_r = P/P_c$ при $a \to 0$, имеем

$$\frac{dP}{da} = \frac{T^{\gamma_0+2}}{\zeta(\gamma_0+2)}.\tag{38}$$

Поэтому

$$\frac{dP}{dZ} = -\frac{(2T)^{\gamma_0+2}}{\zeta(\gamma_0+2)}.$$
(39)

Мы вычислили угол, под которым из точки P = 0, Z = 1 выходят изотермы газа, критическое значение фактора сжимаемости которого равно

$$Z_c = \frac{\zeta(2+\gamma_0)}{\zeta(1+\gamma_0)}.\tag{40}$$

Мы получили обобщение адиабаты Пуассона для случая дробного числа степеней свободы.

Уравнение изотермы для фиксированного $\gamma = \gamma(T)$ имеет вид

$$Z = \frac{\operatorname{Li}_{\gamma+2}(a)}{\operatorname{Li}_{\gamma+1}(a)}, \qquad P = C(\gamma) \frac{\operatorname{Li}_{\gamma+2}(a)}{\zeta(\gamma_0 + 2)}, \qquad \gamma = \gamma(T), \tag{41}$$

где a - активность, $\infty > a \geq 0,$ а $\mathrm{Li}(a)$ - полилогарифм, а $C(\gamma)$ определяется из совпадения соотношения

$$\begin{cases} Z = \frac{\zeta(2+\gamma)}{\zeta(1+\gamma)}, \qquad P = C(\gamma) \frac{\zeta(2+\gamma)}{\zeta(2+\gamma_0)}; \\ \gamma_0 = 0.222; \\ 2 > \gamma \ge 0.222 \end{cases}$$
(42)

с построенной выше спинодалью. При этом $C(\gamma)$ определяется однозначно.

Действительно, пусть при $0 \le P \le 1$ уравнение четверти эллипса имеет вид P = f(Z).

Тогда

$$C(\gamma) = f\left(\frac{\zeta(\gamma+2)}{\zeta(\gamma+1)}\right) \frac{\zeta(\gamma_0+2)}{\zeta(\gamma+2)}.$$

Если $\gamma = \gamma_c, T_{r,\gamma_c} = 1$, то

$$-\frac{dP}{dZ} = \frac{C(\gamma(T))2^{(\gamma_c+2)}}{\zeta(\gamma_c+2)} = \frac{(2T)^{(\gamma_0+2)}}{\zeta(\gamma_c+2)}$$

Окончательно получаем

$$\frac{C(\gamma(T_r))2^{\gamma(T_r)}}{\zeta(\gamma(T_r)+2)} = \frac{2^{\gamma_0}T_r^{(2+\gamma_0)}}{\zeta(\gamma_0+2)}, \qquad T_r = \frac{T}{T_c}.$$
(43)

Теперь соотношение для определения $\gamma(T)$ принимает вид

$$\frac{2^{\gamma(T)}}{\zeta^2(\gamma(T)+2)} f\left(\frac{\zeta(\gamma(T)+2)}{\zeta(\gamma(T)+1)}\right) = \frac{2^{\gamma_0}T^{2+\gamma_0}}{\zeta^2(\gamma_0+2)}.$$
(44)

Окончательные основные уравнения "критических" изотерм чистого газа, отвечающего значению Z_c (40), имеют вид

$$\begin{cases} Z = \frac{\text{Li}_{\gamma(T)+2}(a)}{\text{Li}_{\gamma(T)+1}(a)}, \\ P = \text{Li}_{\gamma(T)+2}(a) \frac{T^{(2+\gamma_0)} \cdot 2^{(\gamma_0 - \gamma(T))} \zeta(\gamma(T) + 2)}{\zeta^2(\gamma_0 + 2)}. \end{cases}$$
(45)

Для уравнения ВдВ, которому соответствует эллипс, проходящий через точки (Z = 3/8, P = 1) и (Z = 1/2, P = 0), совпадение изотерм настолько точное (см. рисунок 3), что на графике они неразличимы в отличие от рисунка 2. Как показал В.С.Воробьев, без учета закона предпочтения, сформулированного выше, расхождение с экспериментальными данными для азота более значительны.



Рис. 2. Красные линии – изотермы по ВДВ, синие линии – изотермы по Бозе-Эйнштейну. Черная линия – спинодаль.



Рис. 3. Красные линии – изотермы по ВДВ, синие линии – изотермы по Бозе-Эйнштейну с учетом закона предпочтения объединения в кластеры. Черная линия – спинодаль

Поскольку при $T_r \to T_{tr}^0,$ где T_{tr}^0 - тройная точка, отвечающая газу с заданным значением

$$Z_c = \frac{\zeta(\gamma_0 + 2)}{\zeta(\gamma_0 + 1)},$$

изотермы сгущаются, то в этой точке производная спинодали по P на (P, Z) диаграмме равна нулю. Следовательно, четверть эллипса заканчивается не на прямой P = 0, а в точке $\gamma = \gamma_{tr}$ и отвечающем этой точке значении P_{tr} $(\mu \to 0)$. Этим однозначно определяется эллиптическая спинодаль газовой ветки.

Обозначим через $\tilde{T}_c = T_{tr}^0$ критическую температуру виртуального газа, которая совпадает с температурой тройной точки исходного газа. Мы рассматриваем две изотермы: критическую изотерму виртуального газа и изотерму исходного газа при $T = T_{tr}$.

Из уравнения (43) для фиксированного $C(\gamma)$ с $T_p = T_{tr}$, мы можем найти значение γ_{tr} (значение γ в тройной точке). Для известных значений Z_{tr} и P_{tr} , используя формулу(41), мы получаем значение $C(\gamma_{tr})$. Тем самым мы находим на (P, Z) диаграмме конечную точку спинодали (42), в которой производная четверти эллипса исчезает. Мы находим эту точку, используя экспериментальные значения двух крайних точек четверти эллипса, которые являются нашей газовой спинодалью. Таким образом, положение критической точки и тройной точки (хорошо известной из стандартных таблиц) полностью определяет изотерму данного газа.

7.1 Надкритические флюиды

При $T_r > 1$ и $\kappa \leq 0$ определим парастатистические константы $K(T_r)$ на Zeno line, т.е. при $Z = 1, P = \rho T$, из условия Бачинского:

$$P_{r} = T_{r}^{\gamma(T_{r})+2}C(\gamma(T_{r}))\{\operatorname{Li}_{\gamma(T_{r})+2}(a) - \frac{1}{(K(T_{r})+1)^{\gamma(T_{r})+1}}\{\operatorname{Li}_{\gamma(T_{r})+2}(a^{K(T_{r})+1})\},\$$

$$\rho = T_{r}^{\gamma(T_{r})+1}C(\gamma(T_{r}))\{\operatorname{Li}_{\gamma(T_{r})+1}(a) - \frac{1}{(K(T_{r})+1)^{\gamma(T_{r})}}\{\operatorname{Li}_{\gamma(T_{r})+1}(a^{K(T_{r})+1})\}.$$
(46)

$$Z = \frac{P_r}{\rho T_r} = \frac{\operatorname{Li}_{\gamma(T_r)+2}(e^{-\mu/T_r}) - \frac{1}{(K(T_r)+1)^{\gamma(T_r)+1}}\operatorname{Li}_{\gamma(T_r)+2}(e^{-(\mu/T_r)(K(T_r)+1)})}{\operatorname{Li}_{\gamma(T_r)+1}(e^{-\mu/T_r}) - \frac{1}{(K(T_r)+1)^{\gamma(T_r)}}\operatorname{Li}_{\gamma(T_r)+1}(e^{-(\mu/T_r)(K(T_r)+1)})} = 1, \quad (47)$$

$$\frac{T_r}{T_{B,r}} + \frac{\rho}{\rho_B} = 1. \tag{48}$$

Из этой системы мы определяем $\mu = \mu(T)$ и K = K(T).

Находим кривую $\mu = 0$ на графике (Z,P). На этой кривой плотность $\rho = \frac{N}{V}|_{\mu=0}$ имеет вид

$$\rho|_{\mu=0} = C(\gamma)T_r^{\gamma(T_r)+1} \left\{ 1 - \frac{1}{(K(T_r)+1)^{\gamma(T_r)}} \right\} \zeta(\gamma(T_r)+1).$$
(49)

Выбор $\gamma(T_r)$ таков, что $T_r = T_r(\gamma)$, и мы переходим к нормировке, полагая, что $\gamma(T_r)$ есть критическое значение γ , т.е. $T_r(\gamma) = 1$. Поэтому

$$\rho|_{\mu=0} = \left\{ 1 - \frac{1}{(K(T_r) + 1)^{\gamma(T_r)}} \right\} \zeta(\gamma(T_r) + 1).$$
(50)

Точке ($Z = Z_c = \frac{\zeta(\gamma_c+2)}{\zeta(\gamma_c+1)}$, $P = P_c = 1$) на плоскости Z, P отвечают два значения плотности, соответствующих $\gamma = \gamma_c$ и $\gamma = -\gamma_c$, для распределения при $T_r \leq 1, P_r \leq 1$, отвечающего

$$\Omega = -VC(\gamma) \frac{\operatorname{Li}_{\gamma+2}(a)}{\zeta(\gamma_c+2)} \left(\frac{T}{T_r(\gamma)}\right)^{\gamma+2}, \qquad \gamma = \gamma(T_r), \qquad a = e^{-\mu/T}, \tag{51}$$

т.е. две степени свободы $D_1 = 2 + 2\gamma_c$ и $D_2 = 2 - 2\gamma_c$.

Действительно, в дискретном случае для $\gamma < 0$ мы имеем закон отражения (22)–(25)

$$N_c = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j^{\gamma}}{e^{bj} - 1} = \sum_{j=1}^{\infty} j^{\gamma} \frac{1}{bj} + O(b^{-\gamma - 1}) = \zeta(1 + |\gamma|).$$
(52)

Вычислим значение $\mu > 0$, при котором изотерма достигает прямой Z = 1. Имеем $N \to \infty, K \to \infty, N/K > 1$. Как известно [36],

$$P = C(\gamma) \left(\int \frac{\varepsilon^{\gamma} d\varepsilon}{e^{(\varepsilon - \mu)/T} - 1} - (K + 1) \int \frac{\varepsilon^{\gamma} d\varepsilon}{e^{(K+1)(\varepsilon - \mu)/T} - 1} \right).$$
(53)

Обозначим $\mu/T = \nu, \varepsilon/T = \xi$. Получаем

$$I = \int_{0}^{\infty} \left[\frac{1}{e^{\xi - \nu} - 1} - \frac{K + 1}{e^{(K+1)(\xi - \nu)} - 1} \right] \xi^{\gamma} d\xi = \int_{-\nu}^{\infty} \left[\frac{1}{e^{y} - 1} - \frac{K + 1}{e^{(K+1)y} - 1} \right] (y + \nu)^{\gamma} dy = I,$$
(54)

где $\xi - \nu = y$.

Разобьем интеграл І на три

$$I_1 + I_2 + I_3 = \int_{-\delta}^{\delta} + \int_{-\nu}^{-\delta} + \int_{\delta}^{\infty} .$$

Первый интеграл I_1 имеет порядок не больший, чем $\ln N.$ Второй интеграл принимает вид

$$I_2 = \int_{\delta}^{\nu} \left[\frac{1}{e^{-y} - 1} - \frac{K + 1}{e^{-(K+1)y} - 1} \right] (\nu - y)^{\gamma} \, dy =$$
(55)

$$\int_{\delta}^{\nu} \left[K + 1 - \frac{1}{1 - e^{-y}} \right] (\nu - y)^{\gamma} \, dy + O(K e^{-(K+1)\delta}) \approx \int_{\delta}^{\nu} (\nu - y)^{\gamma} \, dy \cdot K + O(\ln K).$$
(56)

Оценим третий интеграл. Второй подын
тегральный член при $K\to\infty$ экспоненциально стремится к нулю, а первый име
ет вид

$$I_3 \sim \int_{\delta}^{\infty} \frac{1}{e^y - 1} (y + \nu)^{\gamma} \, dy.$$
 (57)

Сравним его с

$$I_2 \cong (K+1) \int_0^\nu (\nu - y)^\gamma \, dy$$

Для любого конечного ν справедливо $I_2 \gg I_3$.

Нас интересует область $Z \leq 1$. Отсюда определяем область изменения параметра $0 < \nu < \nu_0(T)$ при $T_r > 1$.

На значение $K(T_r, \gamma)$ накладывается условие

$$P = T_r^{2+\gamma} C(\gamma) \left[1 - \left(\frac{1}{1+K}\right)^{\gamma} \right] \zeta(2+\gamma).$$
(58)

Оно приводит к соотношению для $K(T_r, \gamma)$ при $\mu = 0$.

При изменении знака химпотенциала совершается переход от D_1 к D_2 . По существу это соответствует математическому эквиваленту бозе-конденсата как явлению замораживания или остановки частиц в состоянии бозе-конденсата.

Как уже говорилось, процесс замораживания части частиц соответствует изменению среднего числа степеней свободы.

Замечание 5. Физики привыкли к комплексным накрытиям 2-ым листом. В асимптотических формулах переход ко второму листу известен, например, в многомерном методе перевала при наличии нескольких точек перевала. Известен также в гидродинамических асимптотиках переход через линии Стокса. И лишь недавно А.И.Шафаревичу удалось найти существенно более общий способ выбора правильного листа в случае асимптотического перехода на двулистную область. Эта работа дает существенное продвижение в теории асимптотических решений.

Чтобы получить асимптотические формулы для плотности вблизи $\kappa = 0$ при $\kappa < 0$ и $\kappa > 0$ рассмотрим интегральные формулы для плотности N с учетом конечности N_i . Обобщим оценки (29)–(30) в виде леммы, применимой для парастатистики (46)– (50). Лемма 1. Пусть

$$I = \int_{A_1}^{A} \left(\frac{1}{e^{b(x-\kappa)} - 1} - \frac{k_0}{e^{k_0 b(x-\kappa)} - 1} \right) dx^{\alpha}$$
(59)

где $\alpha = 1 + \gamma, -1 < \gamma < 0, A, A_1$ - константы, много большие единицы. Тогда

$$I = -\frac{1}{b^{\alpha}}c^{(Ab)}_{b\kappa,\gamma} + \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}}c^{(k_0Ab,k_0A_1b)}_{k_0b\kappa,\gamma},$$
(60)

где

$$c_{\kappa,\gamma}^{(A,A_1)} = \int_{A_1}^{A} \left(\frac{1}{\xi - \kappa} - \frac{1}{e^{\xi - \kappa} - 1} \right) d\xi^{\alpha}.$$
 (61)

Доказательство. Сделаем в рассматриваемом интеграле (59) замену $\xi = bx$. Тогда

$$b(x-\kappa) = \xi - b\kappa, \quad d\xi = b \, dx,$$

$$d\xi^{\alpha} = \alpha \xi^{\alpha-1} d\xi = \alpha (\xi/x)^{\alpha-1} x^{\alpha-1} b \, dx = b(\xi/x)^{\alpha-1} \, dx^{\alpha} = b^{\alpha} \, dx^{\alpha}$$

и получаем

$$I = \frac{B}{b^{\alpha}} \int_{A_{1}b}^{Ab} \left(\frac{1}{e^{\xi - b\kappa} - 1} - \frac{k_0}{e^{k_0(\xi - b\kappa)} - 1} \right) d\xi^{\alpha}.$$

Добавляя и вычитая слагаемые, представим рассматриваемый интеграл в виде суммы трех следующих интегралов

$$\frac{1}{b^{\alpha}} \int_{A_{1}b}^{Ab} \left(\frac{1}{e^{\xi - b\kappa} - 1} - \frac{1}{\xi - b\kappa} \right) d\xi^{\alpha} + \frac{1}{b^{\alpha}} \int_{A_{1}b}^{Ab} \left(\frac{1}{\xi - b\kappa} - \frac{1}{(\xi - b\kappa)(1 + \frac{k_{0}}{2}(\xi - b\kappa)))} \right) d\xi^{\alpha} - \frac{k_{0}^{1 - \alpha}}{b^{\alpha}} \int_{A_{1}b}^{Ab} \left(\frac{k_{0}^{\alpha}}{e^{k_{0}(\xi - b\kappa)} - 1} - \frac{k_{0}^{\alpha}}{k_{0}(\xi - b\kappa)(1 + \frac{k_{0}}{2}(\xi - b\kappa)))} \right) d\xi^{\alpha}.$$
(62)

Введя обозначение (61), заключаем, что первый интеграл из (62) равен

$$-\frac{1}{b^{\alpha}}c^{(Ab,A_1b)}_{b\kappa,\gamma}.$$

Во втором интеграле (62) вычитаем дроби, а затем делаем замену $\eta = k_0 \xi$. Тогда

$$k_0(\xi - b\kappa) = \eta - k_0 b\kappa, \qquad d\eta = k_0 d\xi,$$

$$d\eta^{\alpha} = \alpha \eta^{\alpha - 1} d\eta = \alpha (\frac{\eta}{\xi})^{\alpha - 1} \xi^{\alpha - 1} k_0 d\xi = k_0^{\alpha} d\xi^{\alpha}.$$

Итак, второй интеграл из (62) приводится к виду

$$\frac{1}{b^{\alpha}} \int_{A_{1}b}^{Ab} \left(\frac{1}{\xi - b\kappa} - \frac{1}{(\xi - b\kappa)(1 + \frac{k_{0}}{2}(\xi - b\kappa))} \right) d\xi^{\alpha} = \frac{1}{b^{\alpha}} \int_{A_{1}b}^{Ab} \frac{1 + \frac{k_{0}}{2}(\xi - b\kappa) - 1}{(\xi - b\kappa)(1 + \frac{k_{0}}{2}(\xi - b\kappa))} d\xi^{\alpha} = \frac{1}{b^{\alpha}} \frac{k_{0}}{2} \int_{A_{1}b}^{Ab} \frac{1}{(1 + \frac{k_{0}}{2}(\xi - b\kappa))} d\xi^{\alpha} = \frac{1}{b^{\alpha}} \frac{(k_{0})^{1-\alpha}}{2} \int_{A_{1}b}^{Abk_{0}} \frac{1}{1 + \frac{\eta - k_{0}b\kappa}{2}} d\eta^{\alpha} = \frac{k_{0}^{1-\alpha}c_{1}}{b^{\alpha}}, \quad (63)$$

где мы ввели обозначение

$$c_1 = \int_{A_1bk_0}^{Abk_0} \frac{1}{2(1 + \frac{\eta - k_0 b\kappa}{2})} d\eta^{\alpha}.$$

В третьем интеграле из (62) делаем ту же самую замену и получаем

$$\frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}} \int_{A_1 b k_0}^{A b k_0} \left(\frac{k_0^{\alpha}}{e^{k_0 (\xi - b\kappa)} - 1} - \frac{k_0^{\alpha}}{k_0 (\xi - b\kappa) (1 + \frac{k_0}{2} (\xi - b\kappa))} \right) d\xi^{\alpha} = \\
= \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}} \int_{A_1 b k_0}^{A b k_0} \left(\frac{1}{e^{\eta - k_0 b \kappa} - 1} - \frac{1}{(\eta - k_0 b \kappa) (1 + \frac{\eta - k_0 b \kappa}{2})} \right) d\eta^{\alpha} = \\
= \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}} \int_{A_1 b k_0}^{A b k_0} \left(\frac{1}{e^{\eta - k_0 b \kappa} - 1} - \frac{1}{\eta - k_0 b \kappa} + \frac{1}{2(1 + \frac{\eta - k_0 b \kappa}{2})} \right) d\eta^{\alpha} = \\
= \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}} \left(\int_{A_1 b k_0}^{A b k_0} \left(\frac{1}{e^{\eta - k_0 b \kappa} - 1} - \frac{1}{\eta - k_0 b \kappa} \right) d\eta^{\alpha} + \int_{A_1 b k_0}^{A b k_0} \frac{1}{2(1 + \frac{\eta - k_0 b \kappa}{2})} d\eta^{\alpha} \right) = \\
= \frac{-k_0^{1-\alpha} c_{k_0 b \kappa, \gamma}^{(A b k_0, A_1 b k_0)}}{b^{\alpha}} + \frac{k_0^{1-\alpha} c_1}{b^{\alpha}}.$$
(64)

Собирая все вместе, получаем что сумма трех рассматриваемых интегралов (62) равна

$$-\frac{1}{b^{\alpha}}c^{(Ab)}_{b\kappa,\gamma} + \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}}c_1 + \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}}c^{(Abk_0,A_1bk_0)}_{k_0b\kappa,\gamma} - \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}}c_1 = -\frac{1}{b^{\alpha}}c^{(Ab)}_{b\kappa,\gamma} + \frac{k_0^{1-\alpha}}{b^{\alpha}}c^{(Abk_0,A_1bk_0)}_{k_0b\kappa,\gamma}, \quad (65)$$

т.е. интеграл c_1 в итоге сократился.

Подберем значение Λ таким образом, чтобы при $\gamma = \gamma_c$ и $\mu = 0$ отрицательное γ совпадало бы с $-\gamma_c$.

Поскольку мы переходим к такой системе $\gamma(T_r)$, где каждое γ критическое (согласно принципу предпочтения), то каждому значению $\gamma(T_r)$ будет соответствовать свое значение $\Lambda(\gamma)$, так чтобы плотность, отвечающая $\gamma(T_r)$, отвечала бы

$$\zeta(1+|\gamma|)\left(1-\frac{1}{(K(T_r)+1)^{|\gamma|}}\right).$$

Тогда на "спинодали" $\kappa = 0$ плотность, отвечающая отрицательным значениям γ , будет сшиваться с плотностью при $\kappa < 0$. Отрезок положительного химпотенциала μ , при котором $Z(\mu) = 1$, оказывается столь коротким, что при $T = T_c$ он почти прямой. Совпадение при $\kappa < 0$ показано на рисунке 4. При $\kappa > 0$ расхождение резкое, пока мы не перешли на другой лист по принципу отражения. В этом последнем случае, хотя давление при больших $K(T_r)$ растет приблизительно как $K(T_r)$, но Zeno line достигается при столь малом положительном κ , что рост $P(\mu)$ и $Z(\mu)$ оказывается примерно одинаковым, поскольку для плотности N при химпотенциале, умноженном на $k_0 = K$, плотность почти постоянна.



Рис. 4. Изотермы при γ=0.312. Красные линии – изотермы по ВдВ, синие линии - парастатистические изотермы, отвечающие разным значениям k.

Поскольку плотность $\rho(T_r)$ в точке $T_r > 1$, $\gamma(T_r)$ мы продолжаем на "другой лист", т.е. в силу принципа отражения (22)–(25) на значение $-\gamma(T_r)$, то согласно лемме, разбивая интеграл, отвечающий значению $-\gamma(T_r)$, мы получаем, что $\rho(T_r)$ в главном члене растет как $K^{+\gamma(T_r)}$. Кроме того, поскольку химпотенциал, отвечающий плотности, умножается на K, то изменение химпотенциала плотности $K\mu$ отвечает столь малому изменению μ для давления, что 1) Zeno line Z = 1 достигается на достаточно малом химпотенциале μ , и 2) Z вначале падает, а затем растет одновременно с P.

7.2 Переход к обобщениям на неидеальный газ

Нетрудно убедиться, что все рассуждения справедливы для общего гамильтониана, в частности, для

$$\frac{p^2}{2m} + V(x).$$

Можно рассмотреть и оператор Гамильтона в квазиклассическом приближении.

Можно также обобщить задачу на случай самосогласованного гамильтониана, т.е. когда

$$V = V\left(x, \int U(x-\xi)\rho(\xi) \,d\xi\right),\tag{66}$$

где $U(x - \xi)$ - потенциал парного взаимодействия Леннарда-Джонса (см. [26]) и $\rho(\xi)$ - плотность в уравнении Власова.

Квазиклассическая асимптотика такой квантовой задачи при $h \to 0$ уже не совпадает с исходным классическим самосогласованным уравнением типа уравнения Власова, а содержит при применении метода комплексного ростка квазиклассическую поправку, которая впервые была обнаружена в работе Боголюбова о слабо неидеальном бозе-газе и которой нельзя пренебречь при $h \to 0$ (см. статью автора "Уравнение Власова" в [27]).

Согласно статье [28], в случае потенциала отталкивания (т.е. в области надкритической температуры $T > T_c$) возникает два типа частиц: "сверхтекучие" и нормальные.

Таким образом, в области $T > T_c$ возникает двужидкостная ситуация, причем, частицы одной жидкости проходят без столкновения через частицы другой.

Вероятно, это кластеры и мономеры: надкритическая "жидкость-газ" мутна от кластеров, мономеры проходят через них практически без торможения.

Метод комплексного ростка, разработанный подробно автором [29], заключается, грубо говоря, в том же, что и так называемое u - v-преобразование Боголюбова: собственные функции, отвечающие собственным значениям, лежащим вблизи точек, где производная потенцила обращается в ноль, имеют вид

$$\Psi(x) = A(x)e^{-\bar{x}^2/h} + O(h), \tag{67}$$

где $\bar{x}^2 = \sum_{i=1}^3 \alpha_i (x_i - x_i^0)^2$, при чем A(x) и α_i вычисляются из уравнения в вариациях вблизи соответствующей критической точки.

Замечание 6. Комплексным метод называется потому, что он вписывается в общую квазиклассику вида $\sqrt{\rho(x)}e^{(i/n)S(x)}$, где действие S(x) чисто мнимое, а ростком он называется потому, что в силу (67) вне точки $\bar{x} = 0$ функция $\Psi(x) = O(h)$. А следовательно, комплексное (мнимое) действие от S(x) может быть вычислено лишь вблизи точки $\bar{x} = 0$.

Замечание 7. В работе Боголюбова парадоксальный факт 3 не так бросается в глаза, поскольку в отсутствие внешнего поля квазиклассика всегда совпадает с точным решением.

Метод комплексного ростка [30] есть обобщение u - v-преобразования Боголюбова на случай, например, фокальных точек и других особенностей. В частности, автору удалось распространить известное соотношение Боголюбова [26] на случай, когда присутствует внешнее поле v(x). При этом оказалось, что переход при $h \to 0$, т.е. переход в классическую механику, содержит дополнительный член, обобщающий формулу Боголюбова (6'), приведенную в работе [26], и он остается в классическом пределе, поскольку несмотря на то, что значение h бесконечно мало, оно умножается на константу, вообще говоря, неограниченную. Таким образом, параметр h в этом случае включается в предельную классическую картину (см. также [29], [30]).

Лагранжево многообрази
е $\Lambda^n=\{x=X(\alpha), p=P(\alpha)\}$ инвариантно относительно гамильтоновой системы

$$\dot{x} = \frac{\partial H(x,p)}{\partial p}, \qquad \dot{p} = \frac{\partial H(x,p)}{\partial x},$$
(68)

где

$$H(x,p) = H_0(x,p) + \int d\mu_\alpha H_1(x,p;X(\alpha),P(\alpha)).$$

Здесь $H_0(x, p_x) = p_x^2/2 + V(x)$ и $H_1(x, p_x; y, p_y) = U(x, y), \alpha \in \Lambda^n, d\mu_\alpha$ - инвариантная мера на Λ^n . Лагранжево многообразие лежит на поверхности $H(x, p) = \Omega$. Если Λ^n диффеоморфно проектируется на x-плоскость, то канонический оператор действует как умножение на $\exp\{(i/h)S(x)\}/\sqrt{J}$, где $S(x) = \int p \, dx$ на Λ^n и $J = Dx/D\mu_\alpha$.

Главный член формулы в случае присутствия внешнего поля дает следующую систему относительно функций \tilde{g} и \tilde{c} [31]

$$(i\nabla S\nabla - \tilde{\beta})\tilde{g} + \int U(x, X(\alpha'))\tilde{c}(X(\alpha')) d\mu_{\alpha'} + \frac{h}{2}(-\Delta\tilde{g} + \nabla\ln J\nabla\tilde{g}) = 0,$$

$$(i\nabla S\nabla - \tilde{\beta})\tilde{c} - \Delta\tilde{g} + \nabla\ln J\nabla\tilde{g} - \frac{h}{2}(-\Delta\tilde{c} + \nabla\ln J\nabla\tilde{c}) = 0,$$
 (69)

Мы кратко описали математическую подоплеку получающегося физического результата. Возвращаемся к тем обобщениям идеального газа, которые мы производим для того, чтобы получить неидеальный газ, включив парное взаимодействие.

Математическая трактовка первого обобщения нашей задачи - это переход от гамильтониана, который равен кинетической энергии, к общему гамильтониану. Но здесь возникает трудность, которая связана с тем фактом, который мы называли вязкостью, т.е. торможением, и использовали его подспудно в задаче рассеяния. Здесь мы прежде всего обратимся к точке зрения Ландау на квантово-механическое уравнение Шредингера, которое очень красиво и математически безупречно применил Боголюбов в работе [26].

Как известно [28], вероятностью перехода частицы из состояния λ_k (отвечающего собственному значению λ_k) в состояние $\lambda_{k'}$ (отвечающее собственному значению $\lambda_{k'}$) оператора H_N под действием оператора V_N называется (в квантовой механике) квадрат модуля скалярного произведения ($\Psi_{\lambda_k}, V_N \Psi_{\lambda_{k'}}$).

Это выражение называется "матричным элементом". Это важное физическое понятие существенно меняет представление о стандартных понятиях спектра оператора в функциональном анализе, разбивая спектр оператора на *спектральные сеpuu* [31], [10].

В физике имеет место закон, который Боголюбов называет "энергетически выгодное состояние". Частица с течением времени теряет энергию и переходит на более низкий уровень под влиянием возмущений типа "трения". Сразу из "состояния"уровня λ_i на уровень λ_{i-k} она перейти не может, однако она может сначала перейти на уровень λ_{i-1} , затем на уровень λ_{i-2} и т.д. пока не спустится на уровень λ_{i-k} , а затем в конце концов на нижний уровень λ_1 , который и называется в физике "основным состоянием".

Для того чтобы описать математически возмущения типа трения, мы должны все матричные элементы перехода на более высокие уровни энергии (на большие собственные значения) положить равными нулю. Такой оператор возмущения $\tilde{V}_N^{(s)}$ не будет уже самосопряженным.

Этот подход в простейшем случае, когда гамильтониан равен кинетической энергии, в результате процедуры торможения в конечном счете приводит нас к наименьшему собственному значению. Однако этот подход возможен отнюдь не для всех потенциальных энергий. Здесь мы должны принять во внимание понятие серии собственных значений, определенное автором в работах [32], [33].

Приведем определения спектральной серии.

В физической энциклопедии [34] дается следующее определение спектральной серии: "Спектральные серии - группы спектральных линий, возникающие при разрешенных переходах с различных уровней на один и тот же конечный уровень. Линии спектральных серий сходятся к пределу, или границе спектральных серий. Наблюдаемая совокупность спектральных линий наиболее отчетливо разбивается на спектральные серии в спектрах элементов первых подгрупп периодической системы Менделеева: водорода, гелия, щелочных и щелочно земельных металлов".

Приведем теперь точное математическое определение асимптотических спектральных серий [32].

Определение 1. Пусть L_h – однопараметрическое семейство самосопряжённых операторов в $L_2(\mathbb{R}^n)$, $h \in \mathbb{R}_+$. Фиксируем бесконечно малое число h.

Пусть выбрано стандартное число A > 1. Рассмотрим класс таких стандартных гладких функций f(x), что

$$|f(x)| \le A, \qquad |\nabla f(x)| \le A. \tag{70}$$

Пусть ψ - нормированная собственная функция оператора L_h с конечным собственным значением λ .

Если ψ' - другая такая собственная функция, то скажем, что она входит в *A*-серию относительно (ψ , λ), если

$$(\psi', f\psi) > \frac{1}{A}$$

для некоторого f из класса (70).

Пусть μ таково, что существует собственная функция ψ' с собственным значением μ , входящим в *A*-серию. Это равносильно тому, что

$$\|E_{\mu}f\psi\| > \frac{1}{A}$$

для f из класса (70), где E_{μ} - проектор на собственное подпространство, отвечающее собственному значению μ .

Пусть E^{α}_{μ} - проектор на подпространство, такое, что $E^{\alpha}_{\mu}L_2 \subset E_{\mu}L_2$. Назовем собственным подпространством *А*-серии, отвечающим собственному значению μ , пересечение всех таких подпространств $E^{\alpha}_{\mu}L_2 \subset E_{\mu}L_2$, что

$$||E_{\mu}f\psi|| - ||E_{\mu}^{\alpha}f\psi|| \le \frac{1}{2A}.$$

Таким образом у нас задача разбивается на различные спектральные серии, которые можно трактовать как смеси различных газов или различных жидкостей. В частности, если серий только две, то по аналогии с двухжидкостной моделью Тиса-Ландау, можно говорить о двухжидкостной или двухгазовой модели. Однако автор не стал бы употреблять слово "модель", потому что результаты получаются математически строго обоснованными.

Замечание 8. Как видно из формулы (69), замечательный эффект присутствия параметра h в классическом пределе возможен только в случае, грубо говоря, отталкивающего потенциала. Поэтому согласно общей концепции Zeno line, "двухжидкостная" картина возможна только для надкритических состояний. Мы, таким образом, приходим для надкритического состояния к ситуации, когда у нас имеются две серии:

- 1. нормальная кластерная, в которую, вообще говоря, входят и мономеры;
- 2. сверхтекучая, состоящая исключительно из мономеров.

Минимальные значения второй серии выше, чем нормальной - кластерной. В этом смысле она сверхтекуча, т.е. скорости молекул, отвечающие этой серии, выше некоторой положительной величины. Поскольку мономеры могут принадлежать как одной, так и другой серии, то барьер, разделяющий эти серии не столь высок, как в случае квантового гелия 4. Тем не менее сверхтекучие мономеры без столкновений проходят через кластерные флюиды. Как показано в работе [35], при переходе в надкритическое состояние вязкость резко падает. Возможно, что это следствие наличия сверхтекучей серии.

Автор выражает глубокую благодарность В.С.Воробьеву, Ю.М.Кагану, А.Б.Сосинскому и Д.Широкову и за подробные плодотворные дискуссии.

Список литературы

- [1] Ширяев А.Н. Вероятность. Том 1 // МССМЕ, Москва, 2004.
- [2] Маслов В.П., Маслова Т.В. Неограниченная теория вероятностей и ее приложения // Теория вероятностей и ее применения, 2012, **57** (3), 471–498.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика // Наука, Москва, 1964.
- [4] Вершик А.М. Статистическая механика комбинаторных разбиений и их предельные конфигурации // Функц. анализ и его прил., 1996, **30** (2), 19–39.
- [5] Nazaikinskii V.E. On the Asymptotics of the Number of States for the Bose?Maslov Gas // Math. Notes, 2012 91 (6), 816–823.
- [6] Maslov V.P. and Nazaikinskii V.E. On the distribution of integer random variables related by a certain linear inequality: I // Math. Notes, 2008, 83 (2), 211–237.
- [7] Maslov V.P. and Nazaikinskii V.E. On the distribution of integer random variables related by a certain linear inequality: II // Math. Notes, 2008, 83 (3), 345–363.
- [8] *Маслов В.П., Черный А.С.* О минимизации и максимизации энтропии в различных дисциплинах// Теория вероятностей и ее применения, 2003, **48** (3), 466–486.
- [9] Математическая энциклопедия, т.1 // Советская энциклопедия, Москва, 1977.
- [10] Маслов В.П. Квантование термодинамики и ультравторичное квантование // Институт компьютерных исследований, Москва, 2006.
- [11] Ансельм А.И. Основы статистической физики и термодинамки // Наука, Москва, 1973.
- [12] Эйринг Г. Основы химической кинетики // Мир, Москва, 1985.

- [13] Maslov V.P. Thermodynamics as a multistep relaxation process and the role of observables in different scales of quantities // arXiv:1303.5307v2 [physics.gen-ph], 25 Mar 2013.
- [14] Мандельштам Л.И., М.А.Леонтович М.А. К теории поглащения звука в жидкости // ЖЭТФ, 1937, 7 (3), 438–449.
- [15] Ландау Л.Д., Е.М.Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики, том 3: Квантовая механика: нерелятивистская теория, 2-ое изд. // Наука, Москва, 1964.
- [16] Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. Correspindence between of the ideal Bose gas in a space of fractional dimension and a dense nonideal gas according to Maslov scheme // Russian J. Math. Phys., 2011, 18 (1), 19–25.
- [17] Maslov V.P. Mixture of New Ideal Gases and the Solution of problems in Gibbs and Einstein Paradoxes // Russian Journal of Math. Physics, 2011, 18 (1), 83–101.
- [18] Maslov V.P. The Natural Sequence and Pores in Mathematical Theory of Classical and Quantum Thermodynamics // Math. Notes, 2013, 93 (4), 578–582.
- [19] Maslov V.P. Threshold Levels in Economics // arXiv:0903.4783v2 [q-fin.ST], 3 Apr 2009.
- [20] Erdős P. On some asymptotic formulas in the theory of partitions // Bull. Amer. Math. Soc., 1946, 52, 185–188.
- [21] Dong W.-G, Lienhard J.H. Corresponding states of saturated and metastable properties // The Canadian Journal of Chemical Engineering, 1986, 64 158–161.
- [22] Maslov V.P., Mosolov P.P. Nonlinear Wave Equations Perturbed by Viscous Term. Expositions in Mathematics 31 // Walter de Gruyter, Berlin-New York, 2000.
- [23] Маслов В.П.Квантовая экономика // Наука, Москва, 2006.
- [24] Маслов В.П., Мосолов П.П. Асимптотическое поведение при N → ∞ траекторий N-точечных масс, взаимодействующих по закону Ньютона // Известия АН СССР, серия математика, 1978, 42 (5), 1063–1100.
- [25] Сонин Н.Я. Исследования о цилиндрических функциях и специальных полиномах // Государственное издательство технико-теоретической литературы (ГИТТЛ), Москва, 1954.
- [26] Боголюбов Н.Н. К теории сверхтекучести // Избранные труды в трех томах, Том 2. Наукова Думка, Киев, 1970, с. 210–224.
- [27] Маслов В.П. Уравнение Власова // Энциклопедия низкотемпературной плазмы (ред. В.Е. Фортов), Серия В, том VII - 1/3, Математическое моделирование в низкотемпературной плазме. Янус-К, Москва, 2008, с. 209-242.
- [28] Маслов В.П. Математические аспекты теории слабо неидеального бозе и ферми газа на кристаллической подложке // Функц. анализ и его приложения, 2003, 37 (2) 16–27.

- [29] Маслов В.П. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях // Наука, Москва, 1977.
- [30] Маслов В.П., Шведов О.Ю. Метод комплексного ростка // УРСС, Москва, 2000.
- [31] Maslov V.P. Quasi-Particles Associated with Lagrangian Manifolds Corresponding to Semiclassical Self-Consistent Fields. IV-XI // Russian J. Math. Phys., 3:3 (1995) 401-406; (4) 529-534 (1995), 4 (1) 117-122, (2) 265-270, (4) 539-546 (1996), 5 (1) 123-130, (2) 273-278, (3) 405-412 (1997).
- [32] Маслов В.П. Спектральные серии, сверхтекучесть и высокотемпературная сверхпроводимость // Мат. Заметки, 1995, 58 (6) 933–936.
- [33] Maslov V.P. Spectral Series and Quantization of Thermodynamics // Russian J. Math. Phys., 2002, 9 (1), 112–122.
- [34] Физический энциклопедический словарь Том 5 // Советская энциклопедия, Москва, 1966.
- [35] Бражкин В.В., Ляпин А.Г., Рыжов В.Н. и др. Где находится область сверхкритического флюида на фазовой диаграмме? // Успехи физ. наук, 2012, 182 (11) 1137–1156.
- [36] *Квасников И.А.* Термодинамика и статистическая физика: Теория равновесных систем, Том 2 // УРСС, Москва, 2002.

ELIMINATION OF PRECONCEIVED MATHEMATICAL ERRORS IN THERMODYNAMICS AND QUANTUM STATISTICS. NEW THERMODYNAMICS

V.P. Maslov

Lomonosov Moscow State University

v.p.maslov@mail.ru

Received 10.01.2014

The paper deals with the following questions of quantum statistics: (1) the absence of the Bose condensate of the ideal Bose gas in the two- and one-dimensional cases; (2) the concentration of the Bose condensate of the ideal Bose gas only at one lower spectral level of the Schrödinger operator. The discrepancy between the notion of Boltzmann–Maxwell ideal gas and the notion of rarefied saturated vapor is discussed in the classical statistics. The appearance of clusters results in the total reconsideration of the Clapeyron equation as an equation depending on the number of degrees of freedom. It is shown that the number of degrees of freedom of an ideal gas is fractional as a rule. The first-order phase transition is described for the new ideal gas and ideal virtual liquid using a refined concept of negative pressure for the ideal virtual liquid.

ИНВАРИАНТЫ ХОПФА В МАГНИТНОЙ ГИДРОДИНАМИКЕ И В СУПЕРСКРУЧЕННОЙ ДНК

М.И. Монастырский¹, П.В. Сасоров²

¹Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова, Москва ²Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша, Москва

michael.monastyrsky@gmail.com, pavel.sasorov@gmail.com

Поступила 12.11.2014

Рассматривается структура топологических инвариантов в двух средах. Первый пример связан с проблемой перезамыкания в магнитной гидродинамике, а второй относится к теории суперскрученности ДНК. Несмотря но то, что эти системы сильно различаются, поведение магнитных трубок и процесс суперскручивании ДНК имеют некоторые общие черты, основанные на существовании топологических инвариантов типа инвариантов Хопфа.

УДК 51.76, 51.72, 533.9.01

1 Введение

Коэффициент зацепления Гаусса (1833), определяющий необходимое условие расцепления двух замкнутых кривых, был первым примером топологического инварианта ансамбля зацепленных кривых. Несмотря на простоту формулы Гаусса, в ней скрыто глубокое топологическое содержание. Это стало ясным только в XX веке. Параллельно и, в основном независимо от работ математиков, похожие конструкции (chirality, спиральность) были введены исследователями обычной и магнитной гидродинамики.

Однако, только во второй половине XX столетия стало ясным, какую пользу могут принести аналогии между топологией и соответствующими областями физики и даже молекулярной биологии.

В этой статье будут изучены топологические инварианты в двух различных средах. Исследованы тонкие трубки, составленные из магнитных силовых линий, в процессе магнитного перезамыкания и суперскрученные ДНК. Доказано существование топологических инвариантов типа Хопфа и приведены точные формулы в обоих случаях.

2 Магнитная гидродинамика

2.1 Введение

При движении плазмы с бесконечной проводимостью, т.е. когда электрическое поле \vec{E} , магнитное поле \vec{H} и макроскопическая скорость движения плазмы \vec{v} связаны соотношением: $\vec{E} + (\vec{v} \times \vec{H})/c = 0$, выполняется теорема вмороженности $[1, 2]^1$. Из нее, в частности, следует, что топология конфигурации силовых линий сохраняется, т.е. возможна лишь гладкая деформация силовых линий, не меняющая, в частности, коэффициентов зацепления. При этом, конечно, предполагается, что векторные поля \vec{E} , \vec{H} и \vec{v} достаточно гладкие.

При учете конечной проводимости в рамках (изотропной) магнитной гидродинамики (МГД) уравнение для \vec{H} принимает вид

$$\frac{\partial \dot{H}}{\partial t} = \nabla \times \left(\vec{v} \times \vec{H} \right) - \nabla \times \nu \left(\nabla \times \vec{H} \right) \,. \tag{1}$$

Здесь $\nu > 0$ – так называемая, магнитная вязкость. Вообще говоря, уравнение (1) показывает, что в этом случае не существует никаких инвариантов, характеризующих структуру совокупности силовых линий. Действительно, при $\vec{v} = 0$, например, магнитное поле диссипирует при $t \to \infty$. При этом на достаточно больших временах остается лишь одна наиболее медленно затухающая мода, $\vec{H}(\vec{x})$, топологическая структура силовых линий которой не зависит от топологии силовых линий при t = 0.

Поэтому на первый взгляд тема данной статьи кажется тривиальной: при $\nu = 0$ сохраняется любой топологический инвариант, а при $\nu > 0$ топологических инвариантов нет. Вопрос становится, однако, менее тривиальным, если мы будем интересоваться скоростью разрушения инвариантов при очень маленьких вязкостях: $\nu > 0$.

Рассмотрим конфигурацию плазмы и магнитного поля с характерным размером L, эволюция которой описывается уравнением (1) и подразумеваемыми другими уравнениями МГД, определяющими, в частности, $\vec{v}(\vec{x},t)$ [1, 2]. В такой ситуации имеется два характерных масштаба времени: диффузионное время $\tau_d = L^2/\nu$ и гидродинамическое время $\tau_H = L/c_A$, где $c_A = \sqrt{H^2/4\pi\rho}$ – альфвеновская скорость, ρ – плотность плазмы. При малых ν магнитное число Рейнольдса $\text{Re}_m = \tau_d/\tau_H \gg 1$ велико. В этом случае изменение топологической магнитного поля может происходить на временах τ много меньших, чем τ_d . Действительно, не исключено, что характер МГД движений таков, что возникает самопроизвольное резкое уменьшение масшта-

 $^{^1 \}mathrm{C}$ ледует напомнить, что здесь $\nabla \cdot \vec{H} \equiv 0,$ как и для любого магнитного поля.

бов изменения \vec{v} и \vec{H} на временах ~ τ_H . Примеры подобного рода встречаются в различных задачах: турбулентности [3], при формировании ударных волн [3] и токовых слоев [4, 5]. Поэтому роль второго члена в (1) становится существенным на временах τ существенно меньших, чем τ_d , вплоть до τ_H . При этом топологическая структура силовых линий не разрушается полностью, как это имело бы место при $\tau ~ \tau_d$. В этом связи вопрос о существовании топологических инвариантов магнитного поля, сохраняющихся на интервалах $\tau \ll \tau_d$, представляется совершенно корректным и весьма важным.

Первым, кто подошел к этому вопросу с близкими формулировками, был Тейлор [6]. Его результат можно сформулировать следующим образом: если в системе присутвует мелкомасштабная МГД турбулентность, приводящая к тому, что $\langle \vec{j}^2 \rangle \gg \langle \vec{j} \rangle^2$ (здесь $\langle \ldots \rangle$ – пространственное усреднение), то, если и возможны быстрые топологические изменения конфигурации магнитного поля, тем не менее, при этом сохраняется следующий инвариант:

$$h = \int_{\Omega} \vec{A} \cdot \vec{H} \, dV \tag{2}$$

Здесь \vec{A} – вектор-потенциал поля \vec{H} ($\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$), а Ω – полный объем системы, на границе которой $\vec{H}_n|_{\partial\Omega} = 0$. Этот инвариант допускает интерпретацию в терминах зацепления силовых линий [7, 8]. Следуя Арнольду, будем называть этот топологический инвариант асимптотическим инвариантом Хопфа. Для односвязных областей, которые только и будут рассматриваться в этой работе, формула (2) калибровочно-инвариантна. Для неодносвязных областей это не так, что требует небольших технических усложнений (в том числе, ограничений на вид $\vec{A}(\vec{x})$). Все результаты с небольшими переформулировками сохраняются в общем случае.

Результату Тейлора можно придать эквивалентную форму. Быстрая перестройка топологии силовых линий при $\tau \ll \tau_d$ может изменить зацепление отдельных силовых линий вследствие мелкомасштабной турбулентности, но сохраняет полное зацепление. Кадомцев [9] сформулировал этот результат для конфигураций магнитных полей, изменяющихся при крупномасштабных перезамыканиях силовых линий.

В нашей работе [10] дано формальное определение перезамыкания в терминах разрезов и склеек. Оно позволяет придать точный смысл основному утверждению о сохранении единственного топологического инварианта – асимптотического инварианта Хопфа в задаче о быстром перезамыкании в односвязных областях. В многосвязных областях (токамаках) сохраняются дополнительно и полные магнитные потоки. Упомянутое определение конкретизирует соображения Кадомцева, устраняя неопределенность в ведении понятия перезамыкания.

В нашей публикации [11] последние результаты получили дальнейшее развитие. Для магнитного поля \vec{H} , аппроксимируемого системой магнитных силовых трубок с внутренним скручиванием, была явно определена система топологических инвариантов, которые сохраняются на крупномасштабных гладких течениях $\vec{v}(\vec{x},t)$. Это определение обобщает понятие топологических инвариантов высоких порядков [14]. Вводя затем процесс перезамыкания, было показано как меняется внутреннее зацепление каждой силовой трубки и взаимное зацепление различных трубок. Это позволяет по новому взглянуть на сохранение единственного топологического инварианта при перезамыкании – асимптотического инварианта Хопфа.

Эти результаты использовались недавно при исследовании структуры магнитного поля в солнечной короне [12].

2.2 Определения

В этом разделе мы дадим точные определения понятий, рассмотренных в предыдущем разделе.

Рассмотрим сначала коэффициент зацепления, определенный для зацепления l, состоящего из конечного числа ориентированных замкнутых линий l_j (j = 1, 2, ...), вложенных в сферу S^3 [13]. Коэффициент зацепления первого порядка k_1 (l_1, l_2) – хорошо определен для каждой пары непересекающихся кривых. Этот коэффициент зацепления k_1 (l_1, l_2) равен алгебраической сумме чисел пересечения кривой l_1 с поверхностью Z, натянутой на замкнутую кривую l_2 , с учетом ее ориентации, порожденной ориентацией l_2 .

Коэффициент зацепления порядка p определяется для p + 1 замкнутых кривых. Это определение использует так называемые коэффициенты Милнора [14]. Более удобное определение, на языке дифференциальных форм, приведено в книге [13], будет использовано ниже. Определим коэффициент k_p в простейшем нетривиальном случае p = 2, когда $k_1(l_i, l_j) = 0$ (где i, j = 1, 2, 3). Обобщение на произвольные p > 2 (при условии, что $k_i = 0$ при всех i < p) и сравнение с другими инвариантами $l = \{l_i\}$ вместе с доказательствами также приведены в книге [13].

Пусть $B_i \subset S^3$ – граница некоторой трубчатой окрестности замкнутой линии l_i . Пусть B_i не пересекает никакую l_j . Тогда²

$$\int_{B_1} u_1 \wedge u_2 = -\int_{B_2} u_2 \wedge u_1 = k_1 \left(l_1, l_2 \right) \,, \tag{3}$$

где u_i – это 1-формы дуальные (по Александеру) к l_i . Уравнения аналогичные уравнению (3) могут быть определены непосредственно на всем пространстве S^3 с помощью замкнутых 2-форм v_i , заданных на $S^3 \setminus l_i$, так что $\int_{Z_i} v_i = \text{Ind}(Z_i, l_i)$, где Z_i является двумерным циклом в $S^3 \setminus l_i$, а Ind (Z, l) является индексом пересечения $l \in Z$. 3-формы $u_1 \wedge v_2$ и $v_1 \wedge u_2$ определены теперь на всем S^3 , и

$$\int_{S^3} u_1 \wedge v_2 = -\int_{S^3} v_1 \wedge u_2 = k_1(l_1, l_2).$$
(4)

Мы будем называть коэффициентом зацепления первого порядка для зацепления $l = (l_1, \ldots, l_n)$ следующую величину:

$$\bar{k}_1(l) = \max_{1 \le i < j \le n} |k_1(l_i, l_j)| .$$
(5)

Можно показать, что если $k_1(l_1, l_2) = 0$, то справедливо следующее условие. Существуют такая 1-форма u_{12} на $S^3 \setminus (l_1 \cup l_2)$ и такие 2-формы v_{12} и v'_{12} на S^3 , что $d u_{12} = u_1 \wedge u_2, \ d v_{12} = -v_1 \wedge u_2$ и $d v'_{12} = u_1 \wedge v_2$. Допустим, что $\bar{k}_1(l) = 0$ для $l = (l_1, l_2, l_3)$. Тогда следующие дифференциальные формы

$$\tilde{u}_{123} = u_{12} \wedge u_3 + u_1 \wedge u_{23} , \tilde{v}_{123} = -v_{12} \wedge u_3 + v_1 \wedge u_{23} , \tilde{v}'_{123} = u_{12} \wedge v_3 + u_1 \wedge v_{23}$$

являются замкнутыми, и \tilde{v}_{123} и \tilde{v}'_{123} могут быть определены на всем S^3 . Здесь u_{ij} и v_{ij} определены аналогично u_{12} и v_{12} . Как показано в [13], все следующие интегралы:

$$\int_{B_1} \tilde{u}_{123} = -\int_{B_3} \tilde{u}_{123} = \int_{S^3} \tilde{v}_{123} = \int_{S^3} \tilde{v}'_{123}$$

– целые числа. Это целое число называется коэффициентом зацепления второго порядка: $k_2(l_1, l_2, l_3)$.

Рассмотрим теперь определенный класс магнитных полей, обозначаемый ниже как D, и удовлетворяющий следующим условиям.

1. Магнитное поле отлично от нуля только внутри конечного числа магнитных замкнутых силовых трубок $T_i = D^2 \times S^1$ (i = 1, 2, ..., N).

2. Каждая трубка T_i несет магнитный поток Φ_i . Различные поля из класса D могут отличаться друг от друга значениями $\{T_i\}, \{\Phi_i\}, N$, а также структурой поля внутри каждой T_i .

Рассмотрим поперечное сечение трубки T_i . Будем считать, что поле \vec{H} устроено так, что поток вдоль силовых линий магнитного поля порождает диффеоморфизм этих поперечных сечений. Предположим также, что на каждом сечении можно ввести полярную систему координат, так, что этот диффеоморфизм преобразует координатные линии в координатные же линии. Т.е. силовые линии магнитного поля в T_i расположены на двумерных магнитных поверхностях, образующих систему вложенных друг в друга торов, причем коэффициент вращения не зависит от магнитной поверхности, принадлежащей T_i . Таким образом класс D определен однозначно.

Мы предполагаем, что любое магнитное поле хорошо аппроксимируется полями из класса *D*.

Рассмотрим теперь замкнутую силовую линию $l_i(T_i)$ в каждой трубке T_i , соответствующую полюсу полярной системы координат, упомянутой выше. Она может быть и заузленной. Рассмотрим некоторую силовую линию $\gamma \subset T_i \setminus l(T_i)$ и поверхность $Z(T_i)$ натянутую на $l(T_i)$. Тогда число вращения φ_i определяется как среднее число пересечений (с учетом ориентации) кривой γ с $Z(T_i)$ за один полный обход вдоль $l(T_i)$.

Определим теперь число зацеплений для трубок:

$$\hat{k}_1(T_i, T_j) = \begin{cases} \varphi_i & \text{for } i = j \\ k_1(l(T_i), l(T_j)) & \text{for } i \neq j \end{cases},$$
(6)

И

$$\hat{k}_p\left(T_{i_0},\ldots,T_{i_p}\right) = k_p\left(l\left(T_{i_0}\right),\ldots,l\left(T_{i_p}\right)\right) \tag{7}$$

для $p \ge 2$. Последнее определение предполагает, что все коэффициенты зацепления порядка p-1 равны 0.

Введем также

 $^{^2 {\}rm M}$ ы опускаем некоторые топологические детали связанные с определением форм на многообразиях типа $S^3 \backslash l_j$ [13].

$$h_{p,\sigma}\left\{\vec{H}\right\} = \sum_{i_0,\dots,i_p} \left[\prod_{m=0}^p \Phi_{i_m}\right] \hat{k}_p\left(T_{i_0},\dots,T_{i_p}\right) \left[\operatorname{sgn}\hat{k}_p\left(T_{i_0},\dots,T_{i_p}\right)\right]^{\sigma}, \quad (8)$$

где индекс "четности" $\sigma \in (0, 1)$.

Эти величины, определенные для класса D, не зависят ни от способа разбиения магнитного \vec{H} поля на трубки, ни от их упорядочивания. Различные способы разбиения возможны, если некоторые числа вращений φ_i рациональны.

Теорема вмороженности [1, 2] имеет своим следствием (при $\nu \equiv 0$) сохранение топологической структуры магнитных силовых линий, а так же магнитного потока Φ_i в каждой магнитной силовой трубке T_i . Это ведет к сохранению всех $h_{p,\sigma} \{\vec{H}\}$, если временная эволюция поля идет в соответствии с уравнением (1), когда $\nu \equiv 0$, а поле \vec{v} – достаточно гладкое.

Используя [8], нетрудно понять, что

$$h_{1,0}\left\{\vec{H}\right\} = h.$$

$$\tag{9}$$

Сохранение h при $\nu = 0$ хорошо известно. Другие введенные здесь законы сохранения являются новыми.

Введем теперь понятие перезамыкания на подклассе $D_1 \subset D$. Этот класс D_1 определяется условием:

$$\Phi_i = \Phi_j$$
 для всех *i* и *j*.

Ниже под термином перезамыкание в ограниченном смысле подразумеваются преобразование поля \vec{H} , вида $D_1 \rightarrow D_1$. Оно обозначает такое разрезание и склеивание соседних трубок (см. рис. 1), что никакие другие трубки не проносятся через образовавшийся в процессе перезамыкания временной разрыв между трубками. Операция разрезания-склеивания должна дополнительно удовлетворять следующим условиям:

- 1. Отображение, возникающее при склеивании обрезанных концов является гладким.
- 2. Если два конца различных силовых линий склеиваются, то должны склеиваться и оставшиеся концы этой пары силовых линий.
- 3. Не нарушается условие $\nabla \cdot \vec{H} = 0$.
- 4. Магнитные поверхности склеиваются с магнитными поверхностями. Это означает что процесс перезамыкания согласован с определением класса D₁.

Далее под процессом перезамыкания в широком смысле будем подразумевать комбинацию перезамыкания в узком смысле вместе с сдвигом по траекториям решений уравнения (1) с гладким полем скорости \vec{v} и $\nu = 0$. Более детальный анализ анализ концепции перезамыкания в рамках МГД проведен в нашей работе [10], где мы рассмотрели феноменологический базис такого определения. Важно отметить, что определение перезамыкания (для более широкого класса полей), представленное в [10], накладывает более жесткие ограничения, чем условия 1-4. Однако настоящие, менее ограничительные условия достаточны, для наших целей.

Отметим, что, приведенное выше, преобразование перезамыкания, обратимо т.е. обратное преобразование также является перезамыканием.



Рис. 1. Эскиз перезамыкания двух магнитных трубок. Состояние перед перезамыканием показано на рисунке *a*), а после – на *b*)

2.3 Утверждения

Топологическая структура множества магнитных силовых линий меняется в процессе перезамыкания. Легко видно, что если две магнитные трубки T_1 и T_2 перезамыкаются в результирующую магнитную трубку $T': (T_1, T_2) \longrightarrow T'$, тогда

$$\hat{k}_1(T',T') = \hat{k}_1(T_1,T_1) + \hat{k}_1(T_2,T_2) + 2\hat{k}_1(T_1,T_2) , \qquad (10)$$

$$\dot{k}_1(T_3, T') = \dot{k}_1(T_3, T_1) + \dot{k}_1(T_3, T_2)$$
 (11)

Насколько нам известно, эти формулы были впервые введены в работе [11].

Коэффициент 2 в уравнении (10) может быть объяснен качественно следующим образом. Любая силовая линия γ' , принадлежащая T', состоит из двух частей γ_1 и γ_2 . Ее часть γ_1 , принадлежала первоначально (перед перезамыканием) T_1 , а часть γ_2 – T_2 . Линию l(T') можно также рассматривать как композицию $l(T_1)$ и $l(T_2)$. Следовательно поверхность Z(T') натянутая на l(T') может быть получена как композиция двух поверхностей $Z(T_1)$ и $Z(T_2)$, натянутых соответственно на $l(T_1)$ и $l(T_2)$. Среднее число пересечений кривой γ_1 с Z(T') равно $\hat{k}_1(T_1,T_1) + \hat{k}_1(T_1,T_2)$. Первое слагаемое в этой сумме происходит от пересечений с $Z(T_1)$, в то время как второе – от пересечений с $Z(T_2)$. Аналогично, число пересечений кривой γ_2 с Z(T') равно $\hat{k}_1(T_2,T_2) + \hat{k}_1(T_1,T_2)$. В результате мы получаем равенство (10).

Сохранение h [см. (9)] в процессе перезамыкания является следствием уравнений (10) и (11) и определения (7). Таким образом, топологическая структура магнитного поля в процессе перезамыкания не разрушается полностью.

Покажем теперь, что в общем случае нет других, дополнительных к *h* интегралов движения, сохраняющихся в процессе перезамыкания.

В виде примера рассмотрим специальный случай h = 0. Путем конечного числа перезамыканий мы можем перевести множество магнитных трубок $\{T_i\}$ с потоком Φ_0 в каждой трубке в единственную незаузленную трубку T с тем же самым Φ_0 . Поскольку h сохраняется, то T имеет нулевое число вращения: $\varphi = 0$, т.е. все силовые линии незацепленны. Отсюда следует,что все магнитные поля из класса D_1 с данным Φ_0 могут преобразованы друг в друга путем перезамыканий. Это рассуждение легко переносится на общий случай $h \neq 0$. Это означает, что не существует инвариантов, определенных только через \vec{H} , отличных от h, и сохраняющихся при перезамыканиях.

3 Суперскручивание в ДНК

Топологические методы были успешно применены при описании суперскученной ДНК. ДНК описывается формулой Калугареану (CF) [15, 16]³:

$$Lk = Tw + Wr,$$

где Lk коэффициент зацепления Гаусса, Tw – кручение, и Wr – так называемое число райзинга (writhing). Для удобства читателей мы напомним определения этих величин. Детали можно найти в книге [13] и цитируемой в ней литературе.

Пусть γ замкнутая гладкая кривая вложенная в R^3 и v нормальный вектор к γ . Выберем вектор v(t) достаточно короткий, такой, что v(t) пересекается с γ только в одной точке. Конец вектора v описывает кривую γ_v , которая наследует ориентацию γ . Вектор v заметает полоску вложенную в R^3 . Lk есть коэффициент зацепления Гаусса кривых γ и γ_v . Кручение v определяется как:

$$Tw = \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma} v^{\perp} \cdot dv \,,$$

где v^{\perp} нормальный вектор к γ . Кручение есть непрерывная величина, также как и другое число – райзинг Wr. Wr зависит только от γ . Рассмотрим отображение Гаусса для $\gamma \times \gamma$, т.е.

$$\phi: \gamma \times \gamma \to S^2, \quad \phi(x,y) = \frac{y-x}{|y-x|},$$

где пары точек $(x, y) \in \gamma$. Пусть dS – элемент площади на S^2 . Тогда $\phi_*(dS)$ индуцируется ϕ .

Райзинг Wr –есть по определению интеграл

$$Wr = \frac{1}{4\pi} \int_{\gamma \times \gamma} \phi_{\star}(dS) \,.$$

Обычно, формулу (CF) применяют для непрерывных лент, но в реальных процессах, удаление скрученных фрагментов ДНК происходит путем разрезания и склейки. Следуя работе [18], будем называть эту дискретную ленту лестницей. В этом случае формула (CF) должна быть модифицирована как:

$$(Lk-q) = \widetilde{Tw} + \widetilde{Wr} \,.$$

Здесь q – число разрезаний-сшивок, а \widetilde{Tw} и \widetilde{Wr} модифицированные параметры в формуле (CF). Так как мы имеем дело с набором разрезаний и сшивок окончательная формула, после усреднения по всем состояниям имет вид

$$\langle Lk - q \rangle = \left\langle \widetilde{Tw} \right\rangle + \left\langle \widetilde{Wr} \right\rangle$$

 $^{^{3}}$ В статье [17] приведена интересная история открытия формулы CF, ее дальнейшая судьба и связь с понятием спиральности (helicity).

Это объясняет применимость топологических методов при исследовании суперскрученных ДНК с учетом энзиматической активности топоизомераз. Следуя замечанию в [18] покажем, что гидродинамическое описание свободно вращающейся ДНК напоминает гидродинамику одноосного нематического кристалла [19].

Параметр одноосного нематика записывается в виде:

$$A_{ik} = A_0 \left(n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right) \,,$$

где $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ единичный вектор, и δ_{ik} дельта-функция Кронекера. Параметр порядка инвариантен относительно отражений $\vec{n} \to -\vec{n}$.

Топологические характеристики ДНК связаны с уравнениями гидродинамики по формуле

$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial t} = \{H, \vec{n}\},\,$$

где H – гамильтониан выражаемый через плотность энергии: $H = \int E dr^3$. E зависит от состоянии системы, и $\{H, \vec{n}\}$ обозначает скобку Пуассона. С другой стороны, директор \vec{n} при выборе подходящих граничных условий связан с коэффициетом зацепления Гаусса Lk:

$$Lk(\gamma, \gamma_v) = \int (\vec{n}, \nabla, \vec{n}) \, dV \, .$$

Здесь dV элемент объема шара, охватывющего ленту (γ, γ_v) .

4 Заключение

Сформулируем основные результаты статьи.

- Определены топологические инварианты в терминах магнитных силовых трубок и доказано сохранение только асимптотического инварианта Хопфа при перезамыкании силовых линий.
- Формула Калугареану перенесена на лестничные ДНК. Показано, что кинетика ДНК описывается уравнениями аналогичными уравнениям гидродинамики нематических кристаллов. Это позволяет развить теорию, описывающую динамику скрученной ДНК параллельно нематодинамике и сравнить ее с экспериментом (см.[18]).

Сформулируем несколько нерешенных задач, связанных нашей темой.

- 1. Формула Калугареану была получена в предположении, что лента незаузлена. Какова ее модификация, если лента образует нетривиальный узел?
- 2. Каков аналог формулы Калугареану когда (γ, γ_v) имеют тривиальный коэффициент Гаусса, но не нулевые высшие коэффициенты зацепления?

Аналогичные вопросы интересны и для ансамбля зацепленных кривых. В этом случае лента заменяется на поверхность Зейферта. Соответствующий результат был бы интересен в приложении к цепочке взаимодействующих ДНК. Правда, пока нет экспериментальных подтверждений существования таких структур.
5 Благодарности

Работа была подготовлена к печати во время визита одного из авторов (М.М.) в Швейцарию. Он благодарит Федеральную Политехническую Школу (Лозанна, Швейцария) за приглашение и прекрасные условия для работы.

Работа поддержана грантом РФФИ 13-01-00314 и грантом Правительства РФ 11.G34.31.0054.

Список литературы

- [1] *Моффат Г.* Возбуждение магнитного поля в проводящей среде // Наука, М., 1980.
- [2] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред // Наука, М., 1982.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика // Наука, М., 1986.
- [4] Syrovatskii S.I. Pinch Sheets and Reconnection in Astrophysics // Ann. Rev. Astron. Astroph., 1981, 19, 163.
- [5] Isichenko M.B. and Gruzinov A.V. Iso-topological relaxation, coherent structures, and Gaussian turbulence in two dimensional magnetohydrodynamics // Phys. Plasmas, 1994, 1, 1802.
- [6] Taylor J.B. Relaxation of Toroidal Plasma and Generation of Reverse Magnetic Fields // Phys. Rev. Lett., 1974, 33, 1139.
- [7] Woltjer L., A theorem on force-free magnetic fields // Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 1958, 44, 489.
- [8] Arnold V.I. and Khesin B.A., Topological Methods in Hydrodynamics // Springer-Verlag, NY, 1998.
- [9] Кадомцев Б. Б., Перезымыкание силовых линий в магнитной гидродинамике // в сб. Нелинейные волны, Наука, М., 1979, 229.
- [10] Монастырский М.И., Сасоров П.В., Топологические инварианты в магнитной гидродинамике // ЖЭТФ, 1987, **93**, 1210.
- [11] Monastyrsky M.I. and Sasorov P.V., Conservation of topological invariants in MHD // Preprint ITEP 88-63, Atominform, M., 1988.
- [12] Berger M.A., Braids and Magnetic Fields // in book: Berrick A J (et al. eds), Braids, World Scientific, Singapore, 2010, p. 305-328.
- [13] Монастырский М.И., Топология калибровочных полей и конденсированных сред // Паимс, М., 1995; Monastyrsky M.I., Topology of Gauge Fields and Condensed Matter // Plenum, NY, 1993.
- [14] Monastyrsky M.I. and Retakh V.S., Topology of linked defects in condensed matter // Comm. Math. Phys., 1986, 103 445.

- [15] Călugăreanu G., Sur les classes d'isotopie des noeuds tridimensionnels et leurs invariants // Czechoslovak Math. J., 1961 11(86), 588.
- [16] Călugăreanu G., L'intégrale de Gauss et l'analyse des noeuds tridimensionnels, // Rev. Math. Pures Appl., 1959, 4, 5.
- [17] Moffatt H.K. and Ricca R.L. Helicity and the Călugăreanu invariant // Proc. R. Soc. Lond. A, 1992, 439(1906), 411.
- [18] Gabibov A., Yakubovskaya E., Lukin M., Favorov P., Reshetnyak A. and Monastyrsky M., Dynamics of DNA Supercoing // In book: Monastyrsky M. (ed), Topology in Molecular Biology, Springer, NY, 2007 p. 43.
- [19] Kats E.I. and Lebedev V.V., Fluctuational effects in the dynamics of liquid crystals // Springer. NY, 1993.

TOPOLOGICAL INVARIANTS IN MAGNETOHYDRODYNAMICS AND DNA SUPERCOILING

M. Monastyrsky¹, P. Sasorov²

¹Institute for Theoretical and Experimental Physics, Moscow ²Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow

michael.monastyrsky@gmail.com, pavel.sasorov@gmail.com

Received 12.11.2014

We discuss the structure of topological invariants in two different media. The first example relates to the problem of reconnection in magnetohydrodynamics and the second one to the supercoiling of DNA. Despite apparently different systems, the behavior of magnetic spread lines and supercoiling process in DNA has some common based on the existence of Hopf's type topological invariants.

УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА НА ГРАФАХ И СИНГУЛЯРНЫХ ПРОСТРАНСТВАХ: СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА И КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ПАКЕТОВ*

А.А. Толченников¹, В.Л. Чернышев², А.И. Шафаревич³

¹Институт проблем механики РАН имени А.Ю. Ишлинского ²Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики" ³Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

shafarev@yahoo.com, vchernyshev@hse.ru, tolchennikovaa@gmail.com

Поступила 10.12.2014

УДК 514.8+517.958+517.984.5

1 Введение

Уравнения Шрёдингера на геометрических графах изучаются, начиная с 30-х годов прошлого века; изначально они использовались в модели свободных электронов в органических молекулах (см., например, [32]). В последние тридцать лет теория дифференциальных уравнений на графах активно развивается в различных направлениях; одно из них — обобщение уравнений Шрёдингера на так называемые декорированные графы — пространства, получаемые из графов заменой вершин на двумерные или трехмерные поверхности. Такие объекты описывают, в частности,

^{*}Работа поддержана РФФИ (гранты 12-01-31196, 13-01-00664, 14-01-00521) и программой поддержки ведущих научных школ (грант НШ-581.2014.1). В статье использованы результаты, полученные в ходе выполнения проекта 15-01-0091, в рамках Программы "Научный фонд НИУ ВШЭ" в 2015- 2016 гг.

сложные молекулы, атомы в которых обладают внутренними степенями свободы; кроме того, пространства переменной размерности естественным образом возникают при изучении квазидвумерных структур, к которым присоединены одномерные нити (провода). Уравнениям на графах и декорированных графах посвящена огромная литература; ссылки и обзоры различных аспектов теории можно найти, например, в книгах [14] и [2], а также в работах [22], [16], [5].

Авторы этой статьи, совместно с коллегами и учениками, развивали квазиклассическую теорию (то есть изучали асимптотические свойства решений уравнений Шрёдингера в квазиклассическом пределе) на графах и декорированных графах. В частности, в [25] был описан алгоритм вычисления асимптотики собственных значений оператора Шрёдингера на компактном графе, обобщающий известные правила Бора—Зоммерфельда. Квазиклассическая теория нестационарных локализованных волновых пакетов (когерентных состояний) на геометрическом графе развивалась в работах [26], [27], [28], [29], [4], [3]. В частности, была обнаружена связь этой теории с известными задачами аналитической теории чисел об асимптотике числа целых точек в многогранниках или о распределении абстрактных простых чисел (см. [37]). Для декорированных графов исследовалась структура ядра оператора Шрёдингера (то есть пространство "вакуумных" состояний), формулы следов и квазиклассическая асимптотика локализованных волновых пакетов; результаты изложены в работах [10], [27], [11], [4], [3].

Ниже приводится обзор упомянутых выше результатов, а также некоторые новые утверждения, полученные в последнее время. В частности, один из разделов работы посвящен компьютерным экспериментам, связанным с изучением статистики локализованных состояний. Структура работы следующая. В п. 2 мы приводим общее определение оператора Шрёдингера на геометрическом графе и обсуждаем квазиклассические свойства собственных значений и собственных функций. В п. 3 изложены результаты, относящиеся к динамике локализованных волновых пакетов на графе; в частности, изучается статистика числа таких пакетов и устанавливается связь с упомянутыми выше вопросами теории чисел. В п. 4 определяются декорированные графы, операторы Шрёдингера на них, и формулируются теоремы о структуре ядра такого оператора, а также об асимптотике следов экспоненты и резольвенты. В п. 5 описаны начальные факты, относящиеся к динамике локализованных пакетов на декорированных графах; п. 6 посвящен компьютерному моделированию.

2 Оператор Шрёдингера на геометрическом графе. Квазиклассические собственные функции

2.1 Определение оператора Шрёдингера на графе

Под геометрическим графом мы будем понимать одномерный комплекс Γ , состоящий из конечного числа вершин, некоторые пары из которых соединены одним или несколькими ребрами; допускается также наличие конечного числа ребер, выходящих из вершины и гомеоморфных полупрямой. На каждом ребре фиксирована параметризация x_j ; ребра будем обозначать через γ_j , вершины — через a_j . Пусть V непрерывная функция на Γ , гладкая на каждом ребре (потенциал). На каждом ребре (то есть в пространстве $L^2(e_j)$) определен оператор Шрёдингера

$$\hat{H}_j = -\frac{h^2}{2}\frac{d^2}{dx_j^2} + V;$$

для определенности, будем считать, что он задан условиями Неймана в вершинах. Оператор Шрёдингера \hat{H} на графе Γ определяется из следующих требований.

- 1. \hat{H} самосопряженный оператор в $L^2(\Gamma) = \bigoplus_i L^2(e_i)$.
- 2. При разделении графа на отдельные ребра оператор \hat{H} разделяется на операторы \hat{H}_{i} .

Сформулируем строгое определение; в $L^2(\Gamma)$ рассмотрим прямую сумму $\hat{H}_0 = \bigoplus_j \hat{H}_j$; область определения этого оператора — второе пространство Соболева $H^2(\Gamma)$. Ограничим оператор на подпространство функций, зануляющихся во всех вершинах графа (это и есть разделение графа на отдельные ребра); ограничение обозначим через \hat{H}_0 . Ясно, что \hat{H}_0 — симметричный оператор в $L^2(\Gamma)$.

Определение 1 Оператором Шрёдингера на графе Γ называется произвольное самосопряженное расширение \hat{H} оператора \hat{H}_0 .

Все операторы Шрёдингера могут быть описаны явно — они задаются краевыми условиями в вершинах графа. Именно: для каждой вершины и для каждого ребра, инцидентного ей, рассмотрим пару $\psi, h\psi'$ — предел функции и ее производной в вершине на соответствующем ребре (производная вычисляется по направлению, входящему в вершину). Образуем из этих чисел 2*N*-мерный вектор $\xi = (q, p)$, $q = (\psi_1, \ldots, \psi_N), p = (h\psi'_1, \ldots, h\psi'_N)$ (здесь N — число краев ребер). Зафиксируем в C^{2N} со стандартной косоэрмитовой формой $[\tilde{\xi}, \xi] = \sum_{j=1}^{N} (\tilde{p}_j \bar{q}_j - \tilde{q}_j \bar{p}_j))$ лагранжеву плоскость Λ ; каждая плоскость определяет самосопряженный оператор \hat{H} — его область определения состоит из функций, для которых вектор краевых значений ξ лежит в плоскости Λ .

Замечание 1 Каждая лагранжева плоскость — график унитарного оператора; поэтому краевые условия задаются унитарной $N \times N$ матрицей U. Именно: вектор ξ должен удовлетворять равенству

$$(\mathcal{E} - \mathcal{U}_v)q + i(\mathcal{E} + \mathcal{U}_v)p = 0, \tag{1}$$

где \mathcal{E} — единичная $d_v \times d_v$ матрица.

Замечание 2 Общие краевые условия связывают значения функции и ее производных во всех вершинах графа. Более естественно рассматривать отдельные краевые условия в каждой вершине, то есть для каждой вершины задавать унитарную $d \times d$ матрицу (d — степень вершины) и требовать выполнения равенств (1) для ребер, инцидентных данной вершине. Лагранжева плоскость Λ в этом случае — прямая сумма плоскостей, соответствующих отдельным вершинам. В дальнейшем мы рассматриваем именно такие "локальные" краевые условия.

Замечание 3 Иногда оператор Шрёдингера (или Штурма — Лиувилля) задают подругому: вместо краевых условий (1) требуют непрерывности функции на всем графе и так называемых условий α-гладкости ([2]). Такой оператор, вообще говоря, несамосопряжен, и спектр его может быть весьма экзотическим — например, совпадать со всей комплексной плоскостью.

2.2 Квазиклассический спектр и собственные функции

Асимптотика при $h \to 0$ собственных значений оператора Шрёдингера на компактном графе описана в работе [25] в случае так называемых натуральных краевых условий (или условий Кирхгофа). Именно: по графу и по функции V выписывается квадратная матрица $A(\lambda, h)$; в [25] доказано следующее утверждение.

Теорема 1 Пусть $\lambda(h)$ — корень уравнения

$$\det A = 0. \tag{2}$$

Тогда существует собственное значение λ_0 оператора Шрёдингера, для которого $\lambda_0 = \lambda + o(h)$.

Замечание 4 Уравнение (2) представляет собой обобщение известного правила квантования Бора—Зоммерфельда и сводится к нему, если граф состоит из одного ребра. Асимптотические собственные функции конструктивно вычисляются.

В теории квазиклассического квантования хорошо известно, что у оператора Шрёдингера на гладком многообразии часто существуют асимптотические собственные значения и собственные функции, соответствующие устойчивым положениям равновесия классической гамильтоновой системы; в частности, собственные функции локализованы в малой окрестности этой точки. Естественный вопрос: существуют ли аналогичные собственные функции для оператора на графе, локализованные в окрестности его вершины? Известно, что в случае натуральных краевых условий (условий Кирхгофа) таких функций нет — собственная функция из вершины распределяется на инцидентные этой вершине ребра. Оказывается, если краевые условия находятся в общем положении, такие функции, вообще говоря, существуют. Именно: справедливо следующее утверждение.

Теорема 2 (А.Э. Ильмаяров) Пусть v — вершина графа Γ , причем у матрицы \mathcal{U} , определяющей краевое условие в точке v, существует собственное значение Λ , m.ч. $\Im\Lambda > 0$. Тогда существует собственное значение λ_0 оператора Шрёдингера вида

$$\lambda_0 = V(v) - \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda - 1}{\Lambda + 1}\right)^2 + O(h).$$

Соответствующая асимптотическая собственная функция при $h \to 0$ локализована в малой окрестности вершины v (то есть в любой точке, находящейся на не зависящем от h расстоянии от этой вершины, собственная функция есть $o(h^N)$ для любого N). В окрестности вершины асимптотическая собственная функция для любого N имеет вид $\psi(x) = e^{\frac{-S(x)}{h}}\varphi(x,h) + O(h^N)$, где S, φ — гладкие функции, φ — многочлен по h.

Из приведенной теоремы, вообще говоря, не вытекает, что точная собственная функция тоже локализована вблизи вершины. Рассмотрим два простейших примера, в которых собственные значения и собственный функции вычисляются точно. В этих примерах V = 0.

2.2.1 Сходящиеся в одной точке *n* лучей



Утверждение 1 Пусть $E \neq 1$ — собственное значение матрицы U. Тогда $\lambda = -\frac{1}{2} \left(\frac{1-E}{1+E}\right)^2$ — собственное значение \hat{H} ; собственная функция при $h \to 0$ локализована в малой окрестности вершины.

2.2.2 Две вершины, соединенные ребром длины *l*; кроме того, к вершинам присоединены соответственно *n* и *m* бесконечных ребер



Соответствующие унитарные матрицы обозначим $\mathcal{U}_0, \mathcal{U}_1$.

Утверждение 2 Пусть c, k – решение системы уравнений

$$\det\left[(\mathcal{E} - \mathcal{U}_0) - ik(\mathcal{E} + \mathcal{U}_0) diag\left(\frac{(1-c)}{(1+c)}, 1, ..., 1\right) \right] = 0$$
$$\det\left[(\mathcal{E} - \mathcal{U}_1) - ik(\mathcal{E} + \mathcal{U}_1) diag\left(\frac{1-ce^{2\kappa l}}{ce^{2\kappa l}+1}, 1, ..., 1\right) \right] = 0.$$

Тогда $\lambda = k^2 - cobcmbenhoe значение \hat{H}; coombemcmbyющая собственная функция при <math>h \to 0$ локализована в малой окрестности конечного ребра.

3 Динамика локализованных пакетов на графе

Ниже множество всех ребер, смежных с вершиной A, обозначается через $\Gamma(A)$, а e и v обозначают количество ребер и число вершин соответственно.

Нестационарное уравнение Шрёдингера на геометрическом граф
е Γ — это уравнение вида

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi.$$
(3)

Мы выбираем начальные условия в виде узкого пакета, сконцентрированного в окрестности одной точки z_0 , которая лежит на k-м ребре графа:

$$\psi(z,0) = h^{-1/4} K(z_k) \exp\left(\frac{iS_0(z_k)}{h}\right).$$
(4)

$$S_0(x) = w(z_k - z_0)^2 + p_0(z_k - z_0),$$

здесь $z_0 \in \gamma_k$, $p_0 \in \mathbb{R}$, и w комплексное число, с Im(w) > 0, $K(z_j)$ – "срезающая" функция с носителем на ребре γ_k , K = 1 в окрестности точки z_0 . Множитель $h^{-1/4}$ введен, чтобы начальная функция $\psi(z_k, 0)$ имела порядок один в $L^2(\Gamma)$ норме. В силу положительности мнимой части w начальное условие сконцентрировано в малой окрестности z_0 : $\psi(z_k, 0) = O(h^{\infty})$ при $|z_k - z_0| \ge \delta > 0$ (δ не зависит от h). Для простоты мы предполагаем, что $\frac{1}{2}p_0^2 + Q(z_0) > Q(z), \forall z \in \Gamma$, что гарантирует, что на ребрах нет точек поворота (см., например, [33], [35]). Отметим, что в случае присутствия точек поворота нужно просто продеформировать Γ : вырезать из графа точки поворота и рассмотреть связную компоненту, содержащую z_0 .

Асимптотическое решение задачи Коши (3)–(4) описано в [26], [28], где приведены явные формулы.

Теорема 3 (См. [26], [28]) Решение задачи Коши (3)–(4) для $t \in [0,T]$ (T не зависит от h) выражается следующей формулой:

$$\psi = \sum_{j=1}^{N(t)} h^{-1/4} \varphi_j(z_j, t) e^{iS_j(z_j, t)/h} + O(\sqrt{h}),$$
(5)

где $S_j(z_j,t) = S_j^0(t) + P_j(t)(z_j - Z_j(t)) + W_j(t)(z_j - Z_j(t))^2$, причем $P_j(t), Z_j(t)$ являются решениями гамильтоновой системы

$$\dot{z} = H_p, \quad \dot{p} = -H_z, \quad H = \frac{1}{2}p^2 + Q.$$

Эти решения определяются по начальным условиям на выбранном ребре $Z_k(0) = z_0$, $P_k(0) = p_0$; каждая траектория, приходящая в вершину в некоторый момент времени, порождает новые траектории, выходящие по всем ребрам, инцидентным этой вершине, с одинаковым импульсом, равным р. Функции $\varphi_j(z_j,t)$, $S_j^0(t)$ и $W_j(t)$ явно выражены через решение гамильтоновой системы, $ImW_j(t) > 0$. Через z_j мы снова обозначаем координаты на ребре графа, но индекс сейчас соответствует номеру пакета, а не номеру ребра (то есть координаты z_j могут совпадать для разных значений j).

Каждое слагаемое в сумме (5) локализовано в малой окрестности некоторой точки $Z_j(t)$. Здесь мы предполагаем, что все слагаемые, локализованные в окрестности одной точки, образуют один *гауссов пакет*. В дальнейшем, через N(t) мы будем обозначать общее число таких пакетов, то есть общее число слагаемых в (5), локализованных в разных точках.

В статьях [26], [28] было описано рассеяние гауссова пакета в вершине графа. Говоря точнее, было доказано, что любой пакет, приходящий в вершину валентности m, порождает m пакетов, расходящихся по всем ребрам инцидентным вершине. Импульс для этих пакетов одинаков (обозначен выше как P_j), а амплитуды определяются краевыми условиями в вершине. Для случая условий Кирхгофа в вершине валентности m амплитуда делится в следующем отношении: (2 - m)/m для отраженного пакета и 2/m для каждого из m - 1 прошедших пакетов.

Мы будем изучать асимптотику N(t) при $t \to \infty$. Нужно заметить, что эта задача отличается от задачи описания асимптотического поведения решения уравнения Шрёдингера при $t\to\infty$, так как оценка погрешности $O(\sqrt{h})$ справедлива только на конечных временах. Это означает, что мы сначала переходим к пределу при $h\to 0$ и только потом к пределу при $t\to\infty$. Более подробно подобные вопросы обсуждаются, например, в статье [39].

Обозначим через t_j время прохождения *j*-го ребра, то есть время за которое траектория соответствующей гамильтоновой системы проходит ребро. Если начальные условия зафиксированы, то времена прохождения являются аналогами длин ребер.

Замечание 5 Время прохождения любого ребра графа одинаково для всех гауссовых пакетов, которые проходят по этому ребру (при заданных начальных условиях).

В этом параграфе мы предполагаем, что соответствующие краевым условиям лагранжевы плоскости находятся в общем положении. Этого условия достаточно для того, чтобы быть уверенным в том, что когда k гауссовых пакетов пришло одновременно в вершину валентности v, то v пакетов начнут двигаться по ребрам, инцидентным этой вершине.

В [28] было доказано, что число гауссовых пакетов на произвольном конечном компактном графе с несоизмеримыми ребрами удовлетворяет следующей асимптотической формуле:

$$N(t) = Ct^{e-1} + o(t^{e-1}),$$

где е означает число ребер.

Этот результат был получен сведением задачи подсчета числа пакетов к задаче вычисления количества целых точек, лежащих на гранях расширяющегося симплекса. Грубо говоря, главная идея заключается в следующем. Рассмотрим моменты времени, в которые число пакетов может измениться. Это может произойти, только когда пакет приходит в вершину. С точностью до некоторого постоянного слагаемого это происходит в моменты времени вида $n_1t_1 + \cdots + n_et_e$, где n_1, \ldots, n_e – неотрицательные целые. Можно показать, что число пакетов увеличивается, когда хотя бы одно из чисел n_j было равно нулю. Доказано, что главный член асимптотики числа пакетов определяется количеством моментов, когда ровно одно $n_j = 0$. Количество таких моментов, не превосходящих t, равно числу целых точек $n_1, \ldots n_e$ в объединении симплексов, определяемых неравенствами $n_1t_1 + \cdots + n_et_e \leq t$; так как только одно $n_j = 0$, размерность каждого симплекса равна e - 1. Обзор результатов, относящихся к хорошо известной теоретико-числовой задаче о подсчете числа целых точек в симплексе с действительными вершинами, может быть найден, например, в статье [30].

Дальнейшие результаты (как, например, теорема о равномерности распределения или теорема о формуле для коэффициента C) основаны не только на приближении числа целых точек в многограннике его объемом, но и на нетривиальном теоретикочисловом анализе дальнейших поправок, проведенном в [31] (см., также, обзор в книге [38]). Поэтому эти результаты справедливы не для всех несоизмеримых времен прохождения, а только для почти всех.

Теорема 4 (О равномерности распределения, см. [4]) Рассмотрим конечный компактный геометрический граф Г. Рассмотрим отрезок со временем прохождения τ на произвольном ребре Г. Пусть $N_{\tau}(t)$ означает число гауссовых пакетов на этом отрезке к моменту времени t. Тогда для почти всех несоизмеримых (то есть линейно независимых над Q) $t_1, \ldots t_e$, выполняется:

$$\lim_{t \to \infty} \frac{N_{\tau}(t)}{N(t)} = \frac{\tau}{\sum_{j=1}^{e} t_j}.$$

Таким образом, для этого случая распределение пакетов асимптотически равномерно.

Теорема 5 (Старший коэффициент числа пакетов, см. [4]) Рассмотрим конечный компактный геометрический граф Г. Для почти всех несоизмеримых $t_1, \ldots t_E$ коэффициент при старшем члене асимптотики имеет следующий вид:

$$C = \frac{1}{2^{\nu-2}(e-1)!} \frac{\sum_{j=1}^{e} t_j}{\prod_{j=1}^{e} t_j}.$$
(6)

В статье [29] обсуждаются вопросы описания асимптотики количества пакетов для случая линейно зависимых над \mathbb{Q} времен прохождения ребер.

В этой ситуации, вообще говоря, нарушается установленное в [27], [28] соответствие между количеством гауссовых пакетов и числом узлов целочисленной решетки, попадающих на некоторые грани расширяющегося симплекса, однако, анализ их количества все равно возможен.

Сперва рассмотрим произвольный граф, для которого ранг системы времен прохождения равен единице. Оказывается, что число пакетов в этом случае растет только на конечном отрезке времени и стабилизируется на некотором значении, которое зависит от длин циклов.

Утверждение 3 Пусть дан конечный связный граф с временами прохождения ребер $t_1 = n_1 t_0, \ldots, t_e = n_e t_0$, где $n_i \in \mathbb{N}$ и НОД $(n_1, \ldots, n_E) = 1$.

Тогда, начиная с некоторого времени, количество пакетов будет постоянным. При этом: 1) Если существует цикл с временем прохождения, которое не делится нацело на $2t_0$, то

$$N(T) = 2\sum_{i=1}^{e} n_i,$$

2) В противном случае

$$N(T) = \sum_{i=1}^{e} n_i.$$

Теперь рассмотрим ситуацию, когда ранг системы времен прохождения ребер равен двум для случая звездного графа с тремя ребрами. В статье [29] найден главный член асимптотики количества гауссовых пакетов.

Утверждение 4 Пусть есть звездный граф из трех ребер e_1, e_2, e_3 с временами прохождения $t_1 = nt_0, t_2 = mt_0, t_3$, где $n \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{N}$ (НОД(n, m) = 1), а t_3 таково, что ранг t_1, t_2, t_3 над \mathbb{Q} равен 2. Тогда количество пакетов асимптотически равно

$$N(T) = \frac{T}{2} \left(\frac{m+n}{t_3} + \frac{1}{t_0} \right) + o(T).$$

Старший коэффициент был получен при подсчете числа целых точек, попавших не на все двумерные грани симплекса, как в случае линейно независимых ребер, а на некоторые узкие области (полоски), лежащие на них.

Два приведенных утверждения и большое количество компьютерных экспериментов, проведенных вместе с О. В. Соболевым и Е. А. Бурковым, позволяют предположить, что в общем случае число пакетов на конечном компактном графе растет как T в степени $rank\{t_j\} - 1$, где $rank\{t_j\}$ — это ранг системы времен прохождения над \mathbb{Q} .

В общем случае схема нахождения асимптотики числа пакетов для случая конечных компактных графов выглядит так. По геометрическому графу строится некоторый многогранник в пространстве с заданной целочисленной решеткой. На этом многограннике размечается область, подсчет числа целых точек в которой и дает число пакетов.

4 Оператор Лапласа на декорированных графах, ядро, условия типа непрерывности, формулы следов

Неформально говоря, декорированные графы - это топологические пространства, полученные отождествлением концов ребер графа с точками на замкнутых ориентируемых римановых многообразиях размерности 1, 2 или 3. Операторами на таких пространствах можно моделировать гамильтониан заряженной частицы в массиве фуллеренов. Подобные объекты впервые появились в работе Б. С. Павлова [5], где изучалось движение электронов в однородных кристаллах из точечных атомов. Среди работ на эту тему можно отметить диссертацию И. С. Лобанова [6], в которой изучались спектральные свойства операторов Шрёдингера на периодических декорированных графах, работу Й. Брюнинга и В. А. Гейлера [22], в которой изучались свойства операторов на замкнутых многообразиях с прикрепленными полупрямыми, а также работы [7], [8].

4.1 Оператор Лапласа на декорированных графах

Определение 2 Рассмотрим набор отрезков $\{I_i = [0, l_i]\}_{i=1}^n$, а также набор гладких, замкнутых, связных, римановых многообразий $\{M_i\}_{i=1}^n$ с условием dim $M_i \leq 3$. Отождествим концы отрезков с точками на многообразиях, причем так, чтобы разным концам отрезков соответствовали разные точки на многообразиях. Полученное топологическое пространство X будем называть *декорированным графом*.

Обозначим m(i), m'(i) — номера многообразий, к которым примыкает *i*-ый отрезок. Обозначим $q_i \in M_{m(i)}, q'_i \in M_{m'(i)}$ — точки примыкания *i*-го отрезка.

Пусть Δ_i $(i = 1, \ldots, m)$ — самосопряженные операторы Лапласа-Бельтрами на M_i , $\Delta_{i+m}(i = 1, \ldots, n)$ — самосопряженный оператор $-\frac{d^2}{dx^2}$ на L_i с условиями Неймана. Так как $dim M_i \leq 3$, то $D(\Delta_i) = H^2(M_i) \subset C(M)$ (по теореме вложения Соболева) и можно определить операторы $\Delta_{0,i} \subset \Delta_i$ $(i = 1, \ldots, m + n)$:

 $D(\Delta_{0,i}) = \{ f \in D(\Delta_i) | f(q) = 0,$ если q — точка примыкания отрезка к $M_i \}$

$$(i = 1, \dots, m)$$
$$D(\Delta_{0,i}) = \{ f \in D(\Delta_i) | f(0) = f(l_{i-m}) = 0 \} \ (i = m+1, \dots, m+n)$$

Пусть $H_0 = \bigoplus_{i=1}^{m+n} \Delta_{0,i}$ — это симметрический оператор с конечными равными индексами дефекта (4n, 4n) (см. [9]).

Теорема 6 ([22]) Любая функция $f \in D(\Delta_{0,i}^*)$ имеет следующее асимптотическое разложение в окрестности точки вклейки q:

$$f(x) = a_j(f)F_0(x, q_j) + b_j(f) + R(x),$$

 $e \partial e \ a_j(f), b_j(f) \in \mathbb{C},$

$$F_0(x,q) = \begin{cases} -\frac{1}{2} d(x,q), & ecnu \dim M = 1; \\ -\frac{1}{2\pi} \ln d(x,q), & ecnu \dim M = 2; \\ \frac{1}{4\pi} d(x,q)^{-1}, & ecnu \dim M = 3. \end{cases}$$
$$R(x,q) = \begin{cases} o(d(x,q)), & ecnu \dim M = 1; \\ o(1), & ecnu \dim M = 2 \text{ unu } \dim M = 3. \end{cases}$$

d(x,q) — геодезическое расстояние.

Определение 3 Всякое самосопряженное расширение *H* оператора *H*₀ будем называть *оператором Лапласа*—*Бельтрами* на *X*.

Определим линейные операторы $\Gamma^{(j)} : D(H_0^*) \to \mathbb{C}^{4n} (j = 1, 2):$

$$\begin{split} \Gamma_1^{(1)}(f) &= a_{q_1}(f_{m(1)}), \ \Gamma_1^{(2)}(f) = b_{q_1}(f_{m(1)}), \\ \Gamma_2^{(1)}(f) &= a_{q_1'}(f_{m'(1)}), \ \Gamma_2^{(2)}(f) = b_{q_1'}(f_{m'(1)}), \\ \dots \\ \Gamma_{2n-1}^{(1)}(f) &= a_{q_n}(f_{m(n)}), \ \Gamma_{2n-1}^{(2)}(f) = b_{q_n}(f_{m(n)}), \end{split}$$

$$\Gamma_{2n}^{(1)}(f) = a_{q'_n}(f_{m'(n)}), \ \Gamma_{2n}^{(2)}(f) = b_{q'_n}(f_{m'(n)}).$$

$$\Gamma_{2n+1}^{(1)}(f) = -f'_{m+1}(0), \ \Gamma_{2n+2}^{(2)}(f) = f_{m+1}(0),$$

$$\Gamma_{2n+2}^{(1)}(f) = f'_{m+1}(l_1), \ \Gamma_{2n+2}^{(2)}(f) = f_{m+1}(l_1),$$

...

$$\Gamma_{4n-1}^{(1)}(f) = -f'_{m+n}(0), \ \Gamma_{4n-1}^{(2)}(f) = f_{m+n}(0),$$

$$\Gamma_{4n}^{(1)}(f) = f'_{m+n}(l_n), \ \Gamma_{4n}^{(2)}(f) = f_{m+n}(l_n).$$

Каждой лагранжевой плоскости $\Lambda \subset \mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$ соответствует самосопряженное расширение H^{Λ} оператора H_0 такое, что $D(H^{\Lambda}) = \Gamma^{-1}(\Lambda)$ (см. [22]).

Теорема 7 ([10])

$$\ker H^{\Lambda} \simeq L \cap \Lambda,$$

где L — лагранжева плоскость в $\mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$.

Можно написать явную параметризацию плоскости L (см. [10]).

Расширение с условиями непрерывности

Вот два естественных соображения, которые позволяют фиксировать лагранжеву плоскость Λ , задающую оператор Лапласа—Бельтрами H^{Λ} на X.

1 условие. Потребуем, чтобы все непрерывные функции на X из $D(H_0^*)$ (с условиями Неймана на отрезках) лежали в $D(H^{\Lambda})$. Это приводит к следующему условию на плоскость Λ : $K \subset \Lambda$, где K - 2n-мерная плоскость в $\mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$ вида:

$$K = \{ (x_i^1, x_i^2) \mid x_i^1 = 0 \ \forall \ i = 1, \dots, 4n, \ x_j^2 = x_{j+2n}^2 \ \forall \ j = 1, \dots, 2n \}$$

2 условие. Потребуем, чтобы все функции из $D(H^{\Lambda})$ имели совпадающие значения регулярных частей в точках склейки (но функциям разрешается иметь сингулярности в этих точках). То есть

$$D(H^{\Lambda}) \subset \{ f = (f_1, \dots, f_{m+n}) \in D(H_0^*) \mid f_{i+m}(0) = b_{q_i}(f_{m(i)}),$$
$$f_{i+m}(l_i) = b_{q'_i}(f_{m'(i)}) \forall i = 1, \dots, n \}.$$

Это условие означает, что $\Lambda \subset S$, где S - 6n-мерная плоскость в $\mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$ вида:

$$S = \{ (x_i^1, x_i^2) \mid x_j^2 = x_{j+2n}^2 \ \forall \ j = 1, \dots, 2n \}.$$

Утверждение 5 [10] Существует единственная лагранжева плоскость

$$\Lambda_0 = \left\{ \begin{pmatrix} -Y \\ Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ X \end{pmatrix} \mid X, Y \in \mathbb{C}^{2n} \right\},\$$

удовлетворяющая условию $K \subset \Lambda_0 \subset S$, где K и S — введенные выше плоскости.

Теорема 8 ([10]) 1) Для оператора H^{Λ_0} на декорированном графе (полученном декорацией конечного графа Г) выполнено следующее неравенство:

$$\beta_0 \leq \dim \ker H^{\Lambda_0} \leq \beta_0 + \beta_1$$

 $\operatorname{ede} \beta_i = \dim H_i(\Gamma, \mathbb{C}).$

2) Сколь угодно малым изменением длин ребер можно добиться того, чтобы dim ker $H^{\Lambda_0} = \beta_0$.

3) Если связный декорированный граф \tilde{X} получен приклеиванием к связному декорированному графу X новых ребер и многообразий, $\tilde{\Gamma}$ и Γ — их соответствующие графы, \tilde{d} и d — размерности ядер операторов Лапласа с условиями непрерывности на \tilde{X} и X, то выполнено следующее неравенство:

$$\beta_1(\Gamma) - d \le \beta_1(\tilde{\Gamma}) - \tilde{d}.$$

Несложно привести пример (см. [10]) декорированного графа, для которого верхняя оценка этой теоремы достигается.

4.2 След квадрата резольвенты и экспоненты от оператора Лапласа на декорированном графе

Связь характеристик многообразия со спектром оператора Лапласа, построенного по римановой метрике многообразия, проявляется наиболее явно в асимптотических формулах следа для квадрата резольвенты $(\Delta + z^2)^{-2}$ $(z \to \infty)$ и экспоненты оператора $e^{-\Delta t}$ $(t \to 0)$. Для компактного риманова многообразия M (см. [12])

$$Tr \ e^{-\Delta t} \sim (4\pi t)^{-\frac{n}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k,$$

где $a_k = \int_M a_k(x) dw_x$, $a_k(x)$ — полиномиальные выражения от компонент тензора кривизны и их ковариантных производных. В частности, $a_0(x) = 1$, и $6a_1(x)$ — скалярная кривизна.

Отсюда, применяя преобразование Меллина, мы можем найти след квадрата резольвенты. Например, при dim M = 2:

$$Tr(\Delta + z^2)^{-2} \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k k!}{4\pi z^{2k+2}} = \frac{Vol(M)}{4\pi z^2} + \frac{\chi(M)}{6z^4} + \dots$$

Обобщением этих формул на случай декорированных графов посвящена диссертация С. В. Рогановой [11]. Для этих целей использовалась формула Крейна, выражающая разность резольвент двух дизъюнктных расширений (то есть области определений которых пересекаются по нулю) через граничные операторы $\Gamma^{(i)}$. В отличие от классического случая риманова многообразия, формула для следа квадрата резольвенты оператора Лапласа на декорированных графах содержит в качестве коэффициентов при степенях *z* рациональные функции от ln *z*. Получается так называемое псевдоасимптотическое разложение, разложение по $z^{-n} \ln^{-m} z, n, m \in \mathbb{N}$. Такое разложение, если существует, единственно. С. В. Рогановой было вычислено псевдоасимптотическое разложение для расширений специального вида с условиями "локальности" (граничные условия в точке склейки содержат только значения функций, производных и коэффициенты при особенностях в этой точке). Это означает, что граничные условия имеют вид $\Gamma^{(2)} = \Lambda \Gamma^{(1)}$, где Λ — блочно-диагональная матрица.

Теорема 9 ([11]) Рассмотрим декорированный граф, состоящий из двумерных многообразий M_i и ребер $\{L_i\}_{i=1}^n$ с длинами l_i . Рассмотрим оператор Лапласа—Бельтрами H^{Λ} , задаваемый граничными условиями вида $\Gamma^{(1)}f = \Lambda\Gamma^{(2)}f$, где Λ — состоящая из четырех диагональных блоков матрица:

$$\Lambda = \left(\begin{array}{cc} (\lambda_{i,i}) & (\lambda_{i,i+N}) \\ (\overline{\lambda_{i,i+N}}) & (\lambda_{i+N,i+N}) \end{array}\right), \ N = 2n, \ \lambda_{i+N,i+N} \neq 0 \ (i = 1, \dots, N)$$

Пусть $a_{k,i}$ — коэффициенты разложения следа экспоненты обычного оператора Лапласи Бельтрами на многообразии M_i . Тогда след квадрата резольвенты $R(p) = (H^{\Lambda} + p)^{-1}$ имеет следующее p-псевдоасимптотическое разложение при $p \to \infty$:

$$TrR^{2} = \frac{1}{4\pi p} \sum_{M_{i}} Vol(M_{i}) + \frac{1}{6p^{2}} \sum_{M_{i}} \chi(M_{i}) + \frac{1}{4p^{\frac{3}{2}}} \sum_{L_{j}} l_{j} + \frac{N}{2p^{2}} + \sum_{M_{i}} \sum_{k=2} \frac{a_{ki}\Gamma(k+1)}{4\pi p^{k+1}} + \frac{c_{2}(\ln p)}{p^{2}} + \frac{c_{\frac{5}{2}}(\ln p)}{p^{\frac{5}{2}}} + \frac{c_{3}(\ln p)}{p^{3}} + \frac{c_{\frac{7}{2}}(\ln p)}{p^{\frac{7}{2}}} + O\left(\frac{1}{p^{4}}\right),$$

где c_n — рациональные функции, которые имеют следующие $\ln p$ -разложение:

$$c_{2} = \frac{N}{\ln p} + \sum_{i=1}^{N} \left(1 - 2\gamma - 4\pi\lambda_{i,i} + 4\pi \frac{|\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}} \right) \frac{1}{\ln^{2} p} + O\left(\frac{1}{\ln^{3} p}\right),$$

$$c_{\frac{5}{2}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{3}{4\lambda_{i+N,i+N}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{3\pi |\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}^{2}} \frac{1}{\ln p} + O\left(\frac{1}{\ln^{2} p}\right),$$

$$c_{3} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}^{2}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{2a_{1i}\lambda_{i+N,i+N}^{3} + 8\pi |\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}^{3}} \frac{1}{\ln p} + O\left(\frac{1}{\ln^{2} p}\right),$$

$$c_{\frac{7}{2}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{5}{4\lambda_{i+N,i+N}^{3}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{15\pi |\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}^{4}} \frac{1}{\ln p} + O\left(\frac{1}{\ln^{2} p}\right).$$

Применяя преобразование Лапласа $Tr(t \ e^{-tH^{\Lambda}}) \rightleftharpoons Tr(H^{\Lambda} + p)^{-2}$, получаем следующее утверждение.

Теорема 10 ([13]) В условиях предыдущей теоремы:

$$t \cdot Tr(e^{-tH^{\Lambda}}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{M_i} Vol(M_i) + \frac{1}{6} \sum_{M_i} \chi(M_i) \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j \ t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} \ t^{\frac{1}{2}} +$$

$$+\sum_{M_i}\sum_{k=2}\frac{a_{ki}}{4\pi} t^k + s_1(\ln t)t + s_{\frac{3}{2}}(\ln t)t^{\frac{3}{2}} + s_2(\ln t)t^2 + s_{\frac{5}{2}}(\ln t)t^{\frac{5}{2}} + O(t^3),$$

где $s_n - \phi$ ункции, которые имеют следующее $\ln t$ -разложение:

$$s_{1} = -N\frac{1}{\ln t} + \left(\sum_{i=1}^{N} \left[1 - 2\gamma - 4\pi\lambda_{i,i} + 4\pi\frac{|\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}}\right] - \Gamma'(2)N\right) \frac{1}{\ln^{2} t} + O\left(\frac{1}{\ln^{3} t}\right),$$

$$s_{\frac{3}{2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}} - \frac{4}{\sqrt{\pi}}\sum_{i=1}^{N}\frac{\pi|\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}^{2}} \frac{1}{\ln t} + O\left(\frac{1}{\ln^{2} t}\right),$$

$$s_{2} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}^{2}} - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{2a_{1i}\lambda_{i+N,i+N}^{3} + 8\pi|\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}^{3}} \frac{1}{\ln t} + O\left(\frac{1}{\ln^{2} t}\right),$$

$$s_{\frac{5}{2}} = \frac{2}{3\sqrt{\pi}}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}^{3}} - \frac{8}{3\sqrt{\pi}}\sum_{i=1}^{N}\frac{\pi|\lambda_{i,i+N}|^{2}}{\lambda_{i+N,i+N}^{4}} \frac{1}{\ln t} + O\left(\frac{1}{\ln^{2} t}\right).$$

Теорема 11 ([13]) Для оператора H^{Λ_0} с условиями "непрерывности"

$$Tr(H^{\Lambda_0} + z^2)^{-2} = \sum_{M_i} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_{ki}k!}{4\pi z^{2k+2}} + \sum_{L_j} \left(\frac{l_j}{4z^3} + \frac{1}{2z^4}\right) + \sum_{k=4}^{\infty} \frac{c_k(\ln z^2)}{z^k},$$

где c_k — рациональные функции

$$c_4(\ln z^2) = \frac{N}{\ln z^2} + \frac{N(1-2\gamma)}{\ln^2 z^2} + O(\frac{1}{\ln^3 z^2}),$$

$$c_5(\ln z^2) = 3\pi N \frac{1}{\ln z^2} + (-6\pi\gamma + 8\pi)N \frac{1}{\ln^2 z^2} + (12\pi\gamma^2 - 32\pi\gamma + 8\pi)N \frac{1}{\ln^3 z^2} + O(\frac{1}{\ln^4 z^2}),$$

$$c_6(\ln z^2) = \sum_{i=1}^N 5\pi a_{1i} \frac{1}{\ln z^2} + \sum_{i=1}^N (16\pi^2 - 10\pi\gamma a_{1i} + 8\pi a_{1i}) \frac{1}{\ln^2 z^2} + \sum_{i=1}^N (-32\pi^2\gamma + 20\pi\gamma^2 a_{1i} + 48\pi^2 - 32\pi\gamma a_{1i}) \frac{1}{\ln^3 z^2} + O(\frac{1}{\ln^4 z^2}),$$

$$c_7(\ln z^2) = \sum_{i=1}^N 28\pi^2 a_{1i} \frac{1}{\ln^2 z^2} + \sum_{i=1}^N (80\pi^3 - 112\pi^2\gamma a_{1i} + 64\pi^2 a_{1i}) \frac{1}{\ln^3 z^2} + \sum_{i=1}^N (-160\pi^3\gamma + 256\pi^3 - 384\pi^2\gamma a_{1i} + 336\pi^2\gamma^2) \frac{1}{\ln^4 z^2} + O(\frac{1}{\ln^5 z^2}).$$

Таким образом, часть разложения, не содержащая логарифмов, (содержащая степени z), совпадает с разложением квадрата резольвенты для прямой суммы операторов Лапласа на многообразиях и операторов Лапласа с условиями Неймана на отрезках, то есть

$$\sum_{M_i} \sum_{k} \frac{b_{ki}}{4\pi z^{2k+2}} + \sum_{L_j} \left(\frac{l_j}{4z^3} + \frac{1}{2z^4}\right).$$

5 Динамика обобщенных гауссовых пакетов на декорированных графах

Пусть Γ_d — декорированный граф; рассмотрим задачу Коши (3) — (4). Мы предполагаем, что точка z_0 лежит на ребре Γ_d (не на поверхности) и что начальная энергия достаточно велика: $\frac{1}{2}p_0^2 + Q(z_0) > Q(z), \forall z \in \Gamma_d$. Опишем сперва, что происходит в момент рассеяния. Для этого достаточно рассмотреть простейшую ситуацию: полу-прямая, соединенная с многообразием.

5.1 Рассеяние на многообразии

Пусть Γ_d — полупрямая, приклеенная к многообразию M в единственной точке q. Пусть t_0 — момент рассеяния (то есть момент, в который траектория системы Гамильтона на полупрямой достигает точки q). Рассмотрим сферу в T_q^*M : $L_0: |p| = |P(t_0)|$. Пусть g_t — поток Гамильтоновой системы на M с гамильтонианом $H = \frac{1}{2}|p|^2 + Q$ и пусть L_t — сдвиг сферы L_0 за время $t: L_t = g_t L_0$.

Теорема 12 *На некотором интервале времени* $t \in (t_0, t_0 + \varepsilon)$ *решение задачи Коши* (3) – (4) имеет вид

$$\psi = \begin{cases} A(t)e^{\frac{iS(z,t)}{h}}, & z \in \mathbb{R}_+, \\ K_{L_t}[B(x,t)], & x \in M. \end{cases} + O(\sqrt{h}) \end{cases}$$

Здесь S(z,t) имеет тот же вид, что и выше (см. теорему 5), K_{L_t} — канонический оператор Маслова на изотропном многообразии L_t с комплексным ростком (см. [33], [34]), функции A и B выражаются явными формулами через матрицу U краевых условий.

Доказательство основано на изучении функции $K_{L_t}[B]$ при $t \to t_0+$; центральное наблюдение состоит в том, что эту функцию можно склеить с экспонентой так, чтобы выполнялись краевые условия.

Замечание 6 При $h \to 0$ носитель функции ψ стремится к $\pi(L_t)$, где $\pi: T^*M \to M$ — естественная проекция. В общем положении ψ локализована вблизи поверхности коразмерности 1; назовем функцию $K_{L_t}[B]$ обобщенным гауссовым пакетом на гиперповерхности. Множество $\pi(L_t)$ назовем носителем обобщенного гауссова пакета. Отметим, что соответствующий классический объект представляет собой не отдельную частицу, а поверхность, заполненную частицами, выпущенными из точки склейки. Классические импульсы всех этих частиц равны по абсолютной величине длина вектора импульса $|P(t_0)|$ совпадает с импульсом входящей частицы. В то же время, направления импульсов произвольны. В частности, если потенциал V равен нулю, частица, попадающая в точку склейки, порождает на поверхности функцию, локализованную вблизи геодезической сферы с центром в точке склейки (например, если M — стандартная сфера, функция локализуется вблизи параллелей).

Замечание 7 Пусть Γ_d — произвольный декорированный граф. В течение некоторого промежутка времени (окрестность момента t_0) решение имеет вид, описанный в

предыдущей теореме. Затем носитель обобщенного гауссова пакета достигает одной из точек склейки (эта точка, в частности, может совпадать с исходной точкой первого рассеяния); в этот момент появляется новый пакет, распространяющийся по отрезку, приклеенному в этой точке, и еще один, распространяющийся по многообразию. Когда один из этих пакетов, в свою очередь, достигает точки склейки, появляется еще два пакета, и так далее. Легко видеть, что, в любой момент времени t, число пакетов, локализованных на ребрах Γ_d (не на многообразиях), совпадает с числом пакетов, локализованных на некоторых отмеченных ребрах нового графа $\tilde{\Gamma}$. Именно: вершины $\tilde{\Gamma}$ соответствуют точкам склейки на Γ_d , а ребра соответствуют временам t_j прохождения траекторий гамильтоновой системы вдоль ребер Γ_d , а также между точками склейки на многообразиях. Две вершины нового графа $\tilde{\Gamma}$, соответствующие отрезкам в Γ_d ; для изучения числа пакетов на этих ребрах можно воспользоваться результатами раздела 3.

5.2 Статистика обобщенных гауссовых пакетов на декорированных графах

Пусть Γ_d – декорированный граф с конечным набором одномерных ребер. Для произвольного конечного t решение задачи Коши имеет вид: $\psi = \sum_j \psi_j + O(\sqrt{h})$, где ψ_j – обобщенные гауссовы пакеты. Пусть N(t) – число пакетов, локализованных на отрезке γ_j на ребре Γ_d . Пусть t_j означает время прохождения траектории классической системы Гамильтона ребра или расстояния между двумя точками вклейки на многообразии.

Рассмотрим две возможные ситуации. Сначала мы будем предполагать, что есть только конечное число времен t_1, \ldots, t_M . Примером такой ситуации может быть стандартная сфера, к которой приклеен в двух несопряженных точках отрезок. Геодезическими на сфере будут две дуги большого круга, таким образом, эквивалентный граф будет иметь две вершины и три ребра.

Теорема 13 Пусть t_j линейно независимы над \mathbb{Q} . Тогда для почти всех t_1, \ldots, t_M и для почти всех лагранжевых плоскостей Λ_j , задающих условия вклейки

$$N(t) = Ct^{M-1} + o(t^{M-1}),$$

npu $t \to \infty$.

Для С справедливо соотношение:

$$C = \frac{\sum\limits_{\gamma_j \in \Gamma_d} t_j}{2^{2e-2}(M-1)! \prod\limits_{all} t_j}.$$

Здесь 2е – число точек q_j вклейки ребер (е – число одномерных γ_j), M – число времен прохождения t_j .

Аналогично, на основании результатов для геометрических графов, можно получить теорему о распределению числа гауссовых пакетов. Пусть δ — отрезок на произвольном ребре Γ_d . Обозначим через N_δ число пакетов, попавших на δ . **Теорема 14** Для почти всех t_1, \ldots, t_M и для почти всех лагранжевых плоскостей Λ_i , задающих условия вклейки выполняется:

$$\frac{N_{\delta}(t)}{N(t)} \to \frac{t_{\delta}}{\sum_{j} t_{j}}$$

 $npu \ t \to \infty.$

Предположим теперь, что число времен t_1, \ldots, t_M бесконечно. Так, например, может быть в ситуации, когда отрезок приклеили к двумерному плоскому тору. Число пакетов в этом случае растет быстрее любого многочлена (см. [4]). Асимптотические оценки для некоторых подобных ситуаций описаны в препринте [3]. В этой статье мы обсуждаем их в последнем разделе, посвященном компьютерным экспериментам. Оценки были получены с использованием результатов из абстрактной аналитической теории чисел (см. [37]) и недавних результатов, посвященных изучению статистики газа Бозе—Маслова (см. статью [36] и ссылки в ней).

6 Компьютерные эксперименты, посвященные моделированию распространения гауссовых пакетов на декорированных графах

Целью этого раздела является описание экспериментов, посвященных моделированию распространения гауссовых пакетов на декорированных графах. Распространение волнового фронта на поверхности происходит вдоль геодезических, поэтому было интересно изучить поверхности с разным устройством множества геодезических, соединяющих две точки. Эксперименты проводились для декорированных графов, имеющих следующий вид: одна вершина (её заменяли на поверхность) с петлей (двумя различными "точками вклейки"). Велся подсчет N(t) на вклеенном ребре. Ниже приводится описание программ, которые позволяют моделировать поведение гауссовых пакетов на некоторых таких графах. Полученные в опытах данные были сверены с асимптотическими оценками роста N(t), выведенными аналитически в статьях [3], [4]. Эксперименты проводились в сотрудничестве с Е. А. Бурковым. Программы были написаны на языке C + +, графики построены в МАТLAВ.

Далее длину вклеенного ребра обозначим L, A и B – точки вклейки этого ребра, $AB_k - k$ -й путь движения волнового фронта по многообразию от A до B. В момент времени t = 0 единственный пакет на графе находится в середине "внешнего" ребра и движется по направлению к точке A. 6.1 Декорированный граф, полученный приклеиванием ребра к сфере



Рисунок 1 – Декорированный граф, полученный из стандартной сферы.

На стандартной сфере геодезическими являются дуги больших кругов и только они, поэтому "волновой фронт", вышедший из точки A, достигнет точки B по двум направлениям за время $a = |AB_1|$ и $b = |AB_2|$. В качестве точек вклейки мы берем две произвольные точки, так чтобы они не были сопряжены друг другу. Эквивалентный граф выглядит следующим образом:



Рисунок 2 – Эквивалентый граф для случая сферы.

Можно заметить, что главный член асимптотики N(t) зависит от r = rank(a, b, L):

- 1. Если r = 1, то N(t) = O(1), то есть число пакетов стабилизируется (пример см. рисунок 3);
- 2. Если r = 2, то N(t) = O(t) (пример см. рисунки 4, 5);
- 3. Если r = 3, то $N(t) = O(t^2)$ (пример см. рисунки 6, 7).



Третий результат соответствует оценке, полученной в [4] (Теорема 4.1):

$$N(t) = Ct^{M-1} + o(t^{M-1}),$$

где M – число ребер графа (в данном случае M = 3).



Замечание 8 Эквивалентный граф для декорированного графа, полученного из стандартной сферы, оказался конечным компактным. Соответственно, рост N(t) оказался степенным, а главный член асимптотики имеет вид Ct^{r-1} , где r = rank(a, b, L) (то есть рангу времен прохождения ребер над \mathbb{Q}). Аналогичный результат для случая звездных графов с тремя ребрами был разобран в статье [29].

6.2 Декорированный граф, полученный приклеиванием ребра к цилиндру



Рисунок 8 – Декорированный граф, полученный приклеиванием ребра к цилиндру.

Рассмотрим цилиндр с длиной окружности b, на котором точки A и B расположены на одной образующей, и кратчайшее расстояние между ними $|AB_0| = a$:



Рисунок 9 – Развёртка цилиндра

Волновой фронт, вышедший из точки A, возвращается обратно за время b и достигает точки B за время $|AB_k| = \sqrt{(kb)^2 + a^2}, k \in \mathbb{Z}_+$. Эквивалентный бесконечный граф выглядит следующим образом:



Рисунок 10 – Эквивалентный граф для случая цилиндра

В [3] (*Теорема 2.1*) дана следующая оценка роста N(t):

$$\ln N(t) \le \pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}} \left(1 + o(1)\right).$$



Пример работы программы для $L = 8, a = \sqrt{2}, b = \sqrt{5}$, подтверждающий оценку:

Замечание 9 Эквивалентный граф для декорированного графа, полученного из цилиндра, оказался бесконечным. Соответственно, рост N(t) является субэкспоненциальным. Полученный по экспериментальным данным график $\ln N(t)$ отличается от оценки из статьи [3] сдвигом на некоторую постоянную, то есть разность принадлежит классу o(t), что соответствует теореме. Более подробно значение этой разности обсуждается в подразделе 6.4.

6.3 Декорированный граф, полученный вклеиванием ребра в плоский тор

Рассмотрим развертку плоского тора – прямоугольник со сторонами a и b. Пусть, без ограничения общности, A совпадает с вершиной прямоугольника, а B имеет на прямоугольнике координаты c и d ($0 \le c < b$, $0 \le d < a$). Тогда $AB = \sqrt{c^2 + d^2}$.



Рисунок 13 – Развёртка плоского тора

"Волна", исходящая из точки A, возвращается обратно через промежутки времени $|AA_i| \in \{\sqrt{(pa)^2 + (qb)^2} \mid p, q \in \mathbb{Z}, GCD(p,q) = 1\}$ и достигает точки B через промежутки времени $|AB_i| \in \{\sqrt{(pa+d)^2 + (qb+c)^2} \mid p, q \in \mathbb{Z}\} \cup \{L\}$. Может случиться, что некоторые из этих путей в развертке лежат на одной прямой: тогда нужно учитывать только кратчайший из этих путей. Определив длины путей, можно рассмотреть эквивалентный бесконечный граф.

В [3] (*Теорема 3.1*) дана оценка следующая оценка роста N(t):

$$\ln N(t) \le 3 \left(\frac{5\pi}{8ab}\zeta(3)\right)^{\frac{1}{3}} t^{\frac{2}{3}} \left(1 + o(1)\right)$$

причем равенство достигается, когда входные параметры задачи линейно независимы над Q.

Пример N(t) с такими параметрами $(a = \pi, b = 3\sqrt{2}, c = \sqrt{3}, d = \sqrt{5}, L = 8)$:





Рисунок 15 – Сравнение верхней оценки и N(t) (разность) – 1

Как видно, экспериментально полученная функция и $3\left(\frac{5\pi}{8ab}\zeta(3)\right)^{\frac{1}{3}}t^{\frac{2}{3}}$ отличаются на постоянное число, что подтверждает оценку. В то же время, когда среди параметров вклейки ребра есть линейно зависимые, невязка растет со временем. Ниже дан тот же график, но для $a = \pi$, b = 4, L = 8, c = 2, d = 1:



Рисунок 16 – Сравнение верхней оценки и N(t) (разность) – 2

6.4 Исследование коэффициента перед экспонентой

Рассмотрим N(t) для случая с цилиндром. Моделирующая программа продемонстрировала результаты, согласованные с асимптотической оценкой роста N(t), данной в [3]:

$$\ln N(t) \le \pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}} \left(1 + o(1)\right).$$

Согласно этой формуле, для случая общего положения, $N(t) = C \exp\left(\pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}}\right) +$ поправки. Значит,

$$\ln N(t) - \pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}} \sim \ln C.$$
(7)



Рисунок 17 – Иллюстрация к утверждению (1)

Как зависит $\ln C$ от входных данных (параметров задачи a, b, L)? Это можно исследовать с помощью моделирующей программы. Попробуем менять один параметр:



Рисунок 18 – Изменение параметра а.

По-видимому, $\ln C = O(a)$ при $a \to \infty$: если поделить полученную функцию на a, она стремится к числу (в данном примере ≈ -0.45):



Рисунок 19



Теперь посмотрим, как $\ln C$ зависит от L и b:

В обоих случаях наблюдается разрыв первого рода в точке L=b.По-видимому, $\ln C=O(L)$ при $L\to\infty:\frac{\ln C}{L}\to C_0\approx-0.09:$



100

Для получения более общего представления можно построить график
и $\ln C$ как функции двух переменных:



Рисунок 23 – Разрыв при L = b



Рисунок 24 – Разрыв при *b* = *L*



Рисунок 25 – Разрыв на прямой
 b=L

Замечание 10 Компьютерный эксперимент показывает, что логарифм константы, которая стоит перед экспонентой в старшем члене асимптотики для N(t), зависит от всех трех параметров, то есть a, b и L. При этом показатель экспоненты зависит только от b. Логарифм константы, по всей видимости, принадлежит классам O(a), O(L)(параметры стремятся к бесконечности) и растет с ростом b. Кроме того, он имеет разрыв 1-го рода при совпадающих значениях параметров.

Список литературы

- [1] Н. И. Ахиезер, И. М. Глазман. Теория линейных операторов в Гильбертовом пространстве. – М., "Наука", 1966.
- [2] Ю. В. Покорный, О. М. Пенкин, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, К. П. Лазарев, С. А. Шабров, Дифференциальные уравнения на геометрических графах, Издво Физ- матлит, М., 2004.
- [3] V. L. Chernyshev, Tolchennikov A. A. Asymptotic estimate for the number of Gaussian packets on three decorated graphs / Working papers by Series math "arxiv.org"./2014/3. No.1403.0263. (http://arxiv.org), 2014. 13 P.
- [4] Chernyshev V. L., Shafarevich A. I., Statistics of gaussian packets on metric and decorated graphs, Philosophical transactions of the Royal Society A., Volume: 372, Issue: 2007, Article number: 20130145, DOI: 10.1098/rsta.2013.0145, 2014.
- [5] Павлов Б. С. Электрон в однородном кристалле из точечных атомов с внутренней структурой. // Теоретическая и математическая физика. – 1987. – Т. 72, N 3.– С. 403–415.
- [6] И.С. Лобанов. Спектральные свойства гамильтонианов явнорешаемых моделей мезоскопических структур: декорированные квантовые графы и квантовые точки. Кандидатская диссертация, 2005.
- [7] Брюнинг Й., Гейлер В.А. Геометрическое рассеяние на компактных римановых многообразиях. // Доклады Академии Наук. – Т. 389, N. 3 – С. 310–313. 2003.
- [8] Брюнинг Й., Гейлер В.А., Лобанов И.С. Спектральные свойства операторов Шрёдингера на декорированных графах. // Математические заметки. –Т. 77, N.6 – С. 932–934. – 2005.
- [9] М.А. Наймарк. Линейные дифференциальные операторы. Наука, 1969.
- [10] А. А. Толченников. О ядре операторов Лапласа-Бельтрами с потенциалом нулевого радиуса и на декорированных графах.// Математический сборник – Т. 199, N7. – 123–138. – 2008.
- S. Roganova. Direct and inverse spectral problems for hybrid manifolds. Dissertation, Humboldt Universitat zu Berlin – 2007.
- [12] S. Rosenberg. The Laplacian on a Riemannian manifold. // London Mathematical Society Student Texts. – Vol. 31. – Cambridge. – 1997.
- [13] А. А. Толченников. Спектральные свойства оператора Лапласа на декорированных графах и на поверхностях с дельта-потенциалами // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, МГУ – 2009.
- [14] Kuchment P., Berkolaiko G. Introduction to Quantum Graphs, Mathematical Surveys and Monographs, V. 186 AMS. 2014.
- [15] Brüning J. and Geyler V. A. Scattering on compact manifolds with infinitely thin horns. J. Math. Phys. 44, 371, 2003.

- 103
- [16] Faddeev M.D., Pavlov B.S. Free electron model and scattering theory. Theor. Math. Phys., 55(2), 257–268. 1983.
- [17] Berkolaiko G. Quantum star graphs and related systems, PhD Thesis, University of Bristol. 135 p. 2000.
- [18] Tanner G. Spectral statistics for unitary transfer matrices of binary graphs, Journal of Physics A 33, 3567–3586. 2000.
- [19] Gavish U., Smilansky U. Degeneracies in the length spectra of metric graphs, Journal of Physics A 40, 2007. 10009–10020.
- [20] Sharp R. Degeneracy in the length spectrum for metric graphs, Geometriae Dedicata 149, 2010. 177–188.
- [21] Gutkin B., Osipov V. Al. Clustering of periodic orbits and ensembles of truncated unitary matrices. http://arxiv.org/abs/1305.0059. 2013. 16 p.
- [22] Gutkin B., Osipov V. Al. Clustering of periodic orbits in chaotic systems, Nonlinearity 26, No 1. 2013. 177–200.
- [23] Harrison J. M., Keating J. P. and Robbins J. M. 2011 Quantum Statistics on Graphs, Proceedings of the Royal Society A - Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 467, Issue: 2125, 2011. 212–233.
- [24] Adami R., Cacciapuoti C., Finco D. and Noja D. On the structure of critical energy levels for the cubic focusing NLS on star graphs., Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 45, Issue 19, article id. 192001, 2012. 7 pp.
- [25] Чернышев В. Л., Шафаревич А. И. Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе. Мат. Заметки. 2007. Т. 82 (№4, 2007). 606–620.
- [26] Chernyshev V. L., Shafarevich A. I. 2008 Semiclassical Asymptotics and Statistical Properties of Gaussian Packets for the Nonstationary Schrödinger Equation on a Geometric Graph. *Russian Journal of Mathematical Physics*, 15, No. 1, 25–34.
- [27] Чернышев В. Л., Толченников А. А., Шафаревич А. И. Асимптотические свойства и классические динамические системы в квантовых задачах на сингулярных пространствах. Нелинейная динамика. 2010. Т. 6, №. 3. 623–638.
- [28] Чернышев В. Л. Нестационарное уравнение Шрёдингера: статистика распространения гауссовых пакетов на геометрическом графе. Труды Математического Института имени В. А. Стеклова. 2010. Т. 270. 249–265.
- [29] Чернышев В. Л., Толченников А. А., Свойства распределения гауссовых пакетов на пространственной сети, Наука и образование: электронное научное издание (МГТУ им. Н.Э. Баумана), 10, 2011.
- [30] Stephen S.-T. Yau, Linda Zhao and Huaiqing Zuo Biggest sharp polynomial estimate of integral points in right-angled simplices. In *Topology of algebraic varieties and singularities*, pp. 433–467. Amer. Math. Soc., Providence, RI. 2011.
- [31] Skriganov M. M. Ergodic theory on SL(n), Diophantine approximations and anomalies in the lattice point problem. *Invent. Math.* **132**, no. 1. 1998. 1–72.
- [32] L. Pauling, J.Chem. Phys., 4, 673, 1936.
- [33] Maslov V. P. The Complex WKB Method for Nonlinear Equations 1: Linear Theory. Springer, 1994. 300 p.
- [34] Maslov V. P. Operational Methods. Mir. 1976. 559 p.
- [35] Maslov V. P., Fedorjuk M. V. Semi-classical approximation in quantum mechanics, Springer, 2002. 316 p.

- [36] Назайкинский В.Е. Об энтропии газа Бозе–Маслова // Докл. РАН. 2013. Vol. 448. No. 3. 266–268.
- [37] Knopfmacher, J. Abstract Analytic Number Theory (2-nd edition). New York, Dover Publishing. 1990.
- [38] Арнольд В.И. Варченко А.Н. Гусейн-Заде С.М., Особенности дифференцируемых отображений (том 1). Классификация критических точек, каустик и волновых фронтов. 1982.
- [39] Roman Schubert, Raul O. Vallejos, Fabricio Toscano. How do wave packets spread? Time evolution on Ehrenfest time scales. Working papers by Series math "arxiv.org"./2011/11. No. arXiv:1112.4056. (http://arxiv.org), 2011. 30 P.

SCHRÖDINGER EQUATION ON GRAPHS AND SINGULAR SPACES: SPECTRAL PROPERTIES AND SEMICLASSICAL DYNAMICS OF LOCALIZED PACKETS

A.A. Tolchennikov¹, V.L. Chernyshev², A.I. Shafarevich³

¹A. Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of the Russian Academy of Sciences ²National Research University Higher School of Economics ³Lomonosov Moscow State University

shafarev@yahoo.com, vchernyshev@hse.ru, tolchennikovaa@gmail.com

Received 10.12.2014

We study spectral properties and semiclassical dynamics of localized packets on graphs and singular spaces. The structure of the paper is as follows. In Section 2 we give a general definition of the Schrödinger operator on a metric graph and discuss semiclassical properties of eigenvalues and eigenfunctions. In Section 3 we present the results related to the dynamics of localized wave packets on a graph. In particular, we study the statistics of the number of packets and establish a connection with some problems in number theory. In Section 4 we define a decorated graph and the Schrödinger operator on it. We formulate several theorems on the structure of the kernel of such operator and on asymptotics of the trace of the resolvent. In Section 5 we describe some facts relating to the dynamics of localized packets on decorated graphs. Section 6 is devoted to the results of computer modeling.

Информация и правила для авторов

Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте http://www.nano-journal.ru. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно илюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издателю журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
 - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
 - о сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверенное печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
 - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: <u>papers@nano-journal.ru;</u> (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: <u>nano@miem.edu.ru</u>) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX.
 К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком _. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров – более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата А4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносок, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда в обычном текстовом редакторе.

• При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов TIFF, EPS, PSD, JPEG.

Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редактров выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

Фамилия И.О. Название статьи // Назв. журн., 2000, 1 (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Jornal, 2006, 73, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

Family F.M. Title of the paper // In book: Family F.M. (et al. eds), Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

Фамилия И.О. Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.
Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций. Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

Учредители

Московский государственный институт электроники и математики (МИЭМ), ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика», Европейский центр по качеству Председатель Совета Учредителей *Тихонов А.Н.*

Издатель

Европейский центр по качеству

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

На первое полугодие 2015 г. подписаться на журнал можно в любом отделении связи по каталогу Агентства Роспечать «Журналы России», рубрика «Физико-математические науки», подписной индекс 70017.

Редакция предлагает подписчикам возможность безвозмездно получить подборку прошлых выпусков журнала. Пришлите на электронный адрес nano@miem.edu.ru (или на почтовый адрес: 109028, Москва, Б. Трехсвятительский пер., 3, к. 452, редакция журнала НМФМ)

копию подписной квитанции, а также адрес для отсылки выпусков.