

Алоджанц А.П., Баженов А.Ю., Царёв Д.В. КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА СЛОЖНЫХ СЕТЕВЫХ СТРУКТУР Учебное пособие



Санкт-Петербург 2018

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Алоджанц А.П., Баженов А.Ю., Царёв Д.В. КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА СЛОЖНЫХ СЕТЕВЫХ СТРУКТУР Учебное пособие

РЕКОМЕНДОВАНО К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ В УНИВЕРСИТЕТЕ ИТМО по направлениям 12.03.05 «Лазерная техника и лазерные технологии», 16.03.01 «Техническая физика», 09.04.02 «Информационные системы и технологии» в качестве учебного пособия для реализации основных профессиональных образовательных программ высшего образования магистратуры



Санкт-Петербург 2018 Алоджанц А.П., Баженов А.Ю., Царёв Д.В. Квантовая статистика сложных сетевых структур. – СПб: Университет ИТМО, 2018. – 60 с.

Рецензент: Боченина Клавдия Олеговна, к.т.н., Университет ИТМО.

Пособие содержит базовую часть теоретического материала по статистической и квантовой физике, а также основы теории графов, и охватывает прикладные физические и математические аспекты фазовых переходов, имеющих место в сложных физических системах, а также в сетевых структурах. В пособии также приводятся типовые задания для практических занятий и вопросы для самоконтроля знаний учащимися.

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Университет ИТМО – ведущий вуз России в области информационных фотонных технологий, один из немногих Российских вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года университет ИТМО – участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди ведущих мировых научно-образовательных центров известный как проект «5» в «100». Цель университета ИТМО – становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

> ©Университет ИТМО, 2018 © Алоджанц А.П., Баженов А.Ю., Царёв Д.В., 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

	ВВЕДЕНИЕ	5
1.	ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ СТИСТИКИ	8
	1.1 Основные принципы статистического описания	8
	1.2 Квантовая статистика идеального газа	. 13
	1.3 Задания для практических занятий	. 15
	1.4 Вопросы и упражнения для самостоятельной работы	. 16
	1.5 Литература	. 17
2.	БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКАЯ КОНДЕНСАЦИЯ В МОДЕЛИ	••••
	ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА	. 18
	2.1 Классический и квантовый идеальные газы	. 18
	2.2 БЭК в трехмерном пространстве	. 19
	2.3 Особенности наблюдения БЭК в различных физических системах	.23
	2.4 Задания для практических занятий	. 30
	2.5 Вопросы и упражнения для самостоятельной работы	. 31
	2.6 Литература	. 32
3.	ГЕНЕРАТИВНЫЕ МОДЕЛИ СЕТЕВЫХ СТРУКТУР	. 34
	3.1 Элементы теории графов	. 34
	3.2 Функция распределения степеней узлов в сетях	. 37
	3.3 Предпосылки применения квантовой теории к социальным системам	41
	3.4 Генерация сетевых структур в модели Бианкони-Барабаши	. 44
	3.5 Фазовые переходы в сетях	. 48
	3.6 Задания для практических занятий	.54
	3.7 Вопросы и упражнения для самостоятельной работы	.55
	3.8 Литература	.56

введение

Важнейшей тенденцией современного этапа развития науки и образования является междисциплинарный и интердисциплинарный подходы, заключающиеся в объединении методов, разработанных различными науками, приводящие к интеграции самих наук в рамках различных отраслей знаний и направленные на решение практических и общественно важных задач в государстве. Неотъемлемой частью этого процесса является применение естественно-научных методов и подходов в когнитивных и социальных науках. С недавних пор сформировались в самостоятельные области знаний новые направления исследований, такие как социофизика, эконофизика, квантовая когнитивистика и др. Они образованы на стыке физических, математических, информационных дисциплин с одной стороны и психологии, социальных и экономических наук с другой, которые направлены на исследования когнитивных возможностей человека, создание систем искусственного интеллекта, характеризации и прогнозирования социума в парадигме быстроразвивающихся коммуникативных возможностей между людьми. Интересно заметить, что один из основоположников социологии Огюст Конт еще на заре ее становления рассматривал социологию как «социальную физику», полагая, что все научные дисциплины являются естественными или «позитивными».

Развитие современных цифровых технологий, телекоммуникаций, всемирной сети Интернет предоставляет людям широчайшие возможности по оперативному обмену информацей и меняет существенным образом характер научной деятельности и образования, а также общества в целом. Ярким примером здесь могут служить социальные сети «Facebook», «Вконтакте», «Одноклассники», «Twitter» и др. (в науке, например, это Research Gate). Они объединяют людей по профессиональному признаку, отношению к различным хобби, музыке, семье, спорту, религии, политике и пр. Важным элементом современной научной деятельности являются наукометрические показатели, формирующиеся благодаря развитой сети Интернет-коммуникаций, электронных библиотек научных журналов, а также гигантских хранилищ данных типа <u>https://arxiv.org/</u> и пр.

Исследования феномена социальных сетей и их влияния на процессы в обществе и экономике имеют относительно короткую историю. Несмотря на всю сложность и многообразие сетевых структур, оказывается, существуют вполне определенные закономерности их роста, функционирования и «отмирания». Обращает также на себя внимание проявление своеобразного эффекта комплексного (коллективного) влияния информации на пользователей сети. По сути, устоявшимся можно считать термин «твиттер-революция» по отношению к событиям стремительного роста протестных настроений в социальных сетях, происходившим уже в этом веке с определенной закономерностью в ряде стран ближнего Востока, а также ближнего зарубежья. Как было верно подмечено в известной уже работе ["Social Laser": action amplification by stimulated emission of social energy. Phil. Trans. R. Soc. A 374, 20150094 (2016)] AHдреем Хренниковым, стремительное нарастание и «сброс» социальной активности благодаря стремительному росту настроений в социальных сетях происходят некоторым универсальным образом, который автор статьи назвал «социальным лазером». Данная аналогия, на наш взгляд, носит достаточно глубокий характер и может быть обоснована в рамках фундаментальных законов статистической физики и статистической механики применительно к распространению информации через социальные сети. Действительно, формирование лазерного излучения представляет собой один из примеров универсального в квантовой физике явления бозонной стимуляции, которая может происходить в совершенно различных по своей природе системах. Примером такой стимуляции может служить так называемый Бозе-Эйнштейновский кон*денсат (БЭК)* – особое состояние вещества, демонстрирующее квантовые эффекты статистики Бозе-Эйнштейна на макроуровне, и который также называют лазером (бозером), стремясь подчеркнуть его коллективные когерентные эффекты. В физике состояние БЭК было получено для коллективных ансамблей атомов (атомный лазер), экситонных поляритонов (поляритонный лазер), магнонов и др. коллективных состояний вещества и/или поля. Все разнообразие и великолепие различных систем, демонстрирующих коллективное когерентное (сверхтекучее) поведение, можно найти в недавно вышедшем в свет сборнике [N. Proukakis, D. Snoke, & P. Littlewood (Eds.), Universal Themes of Bose-Einstein Condensation (pp. Cambridge: Cambridge University Press. 2017]. Однако данное «семейство» было бы не полным, если не учесть коллективные (социальные) системы принятия решений когерентным образом.

Недавно А.Л. Барабаши с коллегами показали, что процесс формирования социальных сетей, несмотря на неравновесный характер, в основных чертах аналогичен формированию БЭК и также может быть описан с помощью методов и подходов статистической физики, см., например, [Albert R., Barabási A. L. Statistical mechanics of complex networks. Reviews of Modern Physics. – 2002. – T. 74. – N_2 . 1. – C. 47]. В таком случае эффект бозонной стимуляции в условиях их стремительного роста может быть присущ самим сетевым структурам, что делает их в определенном смысле похожими на лазер.

Целью настоящего пособия является выявление фундаментальных общих закономерностей в формировании и поведении сложных сетевых структур современными методами статистической физики, статистической механики и квантовой оптики. Так как данная область в своей основе представляет междисциплинарные исследования, то пособие должно быть доступно к пониманию и изучению, что называется, «с нуля» для магистрантов как физических (лазерных и оптических) направлений: 12.03.05 «Лазерная техника и лазерные технологии», 16.03.01 «Техническая физика», так и не физических (математических, компьютерных, и информационных): 09.04.02 «Информационные системы и технологии», 01.04.02 «Прикладная математика и информатика» направлений подготовки Университета ИТМО. В связи с этим

материал, изложенный в пособии, является автономным и базовым для освоения лекций и практических занятий учащимися обозначенных подразделений Университета ИТМО. Более глубокое понимание процессов, изложенных в пособии, требует также более глубокого изучения литературы, представленной к каждому разделу пособия.

В разделе 1 изложены основные сведения, методы и подходы, известные в статистической физике, квантовой теории. Раздел 2 посвящен описанию основ квантовой статистики и явлению бозе-эйнштейновской конденсации. На примерах получения БЭК для атомов и экситонных поляритонов показана специфика данного явления, проявляющаяся в различных системах. Экситонные поляритоны, являющиеся суперпозицией фотонов и экситонов в полупроводниковых микроструктурах, здесь выбраны не случайно. В строгом (термодинамическом) смысле такие системы, помещенные в микрорезонаторы, являются неравновесными. Однако при определенных условиях, налагаемых на материальные параметры системы они могут проявлять свойства БЭК, что подтверждено экспериментально. Таким образом следует «не бояться» в разумных пределах применять законы статистической и квантовой физики к задачам исследования сложных (комплексных) сетевых структур (complex networks), также демонстрирующих свойства фазовых переходов, которые также, вообще говоря, являются неравновесными; этим вопросам посвящен **раздел 3**.

Таким образом, данное пособие должно стать хорошим (стартовым) материалом для студентов-физиков, желающих вплотную заняться изучением сложных сетевых структур, распространением в них социально значимой информации на основе методов и подходов теоретической физики. Вместе с тем, данные методы и подходы могут быть дополняющими компетенции студентов информационного профиля подготовки, проводящим прикладные исследования на основе сетей Интернет и их алгоритмике в Университете ИТМО.

1. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ СТИСТИКИ

1.1 Основные принципы статистического описания

Основная задача статистики. Основной задачей статистического описания (в физике) является выявление особых закономерностей на макроскопическом уровне для многочастичных систем, которые не могут быть сведены к чисто механическим свойствам. Рассмотрим систему, состоящую из N частиц, которая описывает некоторый *газ* молекул или атомов в физике. Рассматриваемые здесь методы статистической физики будут затем использованы и для описания формирования сетевых структур, см. раздел 3.

Чтобы иметь полную информацию о системе, необходимо знать все 6N переменных (не считая времени): 3N координат и 3N проекций импульсов всех частиц системы. Фазовым пространством (ФП) называется пространство, образованное всеми 6N переменными импульсов и координат для N частиц. Элементарным объемом такого пространства является

$$d\boldsymbol{\varpi} = d\mathbf{q}d\mathbf{p} \equiv dq_1 dq_2 \dots dq_{3N} dp_1 dp_2 \dots dp_{3N}.$$
(1.1)

В отличие от классической статистической физики, где тождественные частицы различимы, квантовая статистика основывается на принципе неразличимости тождественных частиц. Причем оказывается, что ансамбли частиц с целым (бозоны) и полуцелым (фермионы) спином описываются разными статистиками. Таким образом, можно разбить фазовое пространство на 6N—мерные элементарные ячейки объёмом dqdp и полагать, что попадание нескольких частиц в любую ячейку приводит к их физической неразличимости по переменным состояниям [1]. В таком случае каждому микросостоянию соответствует одна ячейка, и оно будет меняется при перестановке частиц по ячейкам, а макросостоянию – весь представленный набор 6N-мерных элементарных ячеек, и оно не меняется, пока частицы не выходят за рамки объёма, занятого системой. Объему части фазового пространства, доступной системе, отвечает число различных микросостояний изучаемой системы:

$$\Gamma = \frac{\varpi}{N! (2\pi\hbar)^{3N}}.$$
(1.2)

Энергию системы принято характеризовать функцией Гамильтона, которая как раз выражается через обобщенные координаты и импульсы замкнутой системы следующим образом:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\vec{r_1}, \vec{r_2}, \vec{r_3}, ..., \vec{r_N}), \qquad (1.3)$$

где первое слагаемое описывает кинетическую энергию всех частиц газа имеющих массу *m_i*, а второе – потенциальную энергию частиц. Если энергия взаимодействия между частицами пренебрежимо мала по сравнению с полной энергией газа, то такой газ называют *идеальным*. В стационарном состоянии частицы постоянно движутся, изменяя свои координаты и импульсы, описывая таким образом траекторию в ФП. Очевидно, при этом все микросостояния системы лежат в ФП. В результате макросостоянию системы, описывающему ее равновесное состояние (а это давление, объем и температура), отвечает огромное количество различных микросостояний. Вместе с тем, любое микросостояние может быть рассмотрено как реализация макросостояния. Совокупность систем, обладающих различными микросостояниями, но находящихся в одном макросостоянии, будем называть статистическим ансамблем.

Таким образом, будем полагать, что совокупность всех частиц газа образует так называемый канонический ансамбль – статистический ансамбль, представляющий подсистему, находящуюся в тепловом равновесии с окружающей средой, обмениваясь с ней энергией.

Число микросостояний, которое реализует данное макросостояние определяет термодинамическую вероятность W. Иначе говоря, W определятся через количество систем в статистическом ансамбле, соответствующих определенному макросостоянию. В частности, если ансамбль задан числом систем $f(\mathbf{p},\mathbf{q})d\mathbf{q}d\mathbf{p}$, приходящихся на элемент объема $d\mathbf{q}d\mathbf{p}$ ФП, то термодинамическая вероятность того, что точка ФП попадет в элемент фазового объёма $d\mathbf{q}d\mathbf{p}$, есть

$$dW = f(\mathbf{p}, \mathbf{q})d\Gamma, \qquad (1.4)$$

где $f(\mathbf{p},\mathbf{q})$ — плотность числа систем в фазовом пространстве, удовлетворяющая условию нормировки при интегрировании по всему фазовому объёму:

$$\int_{V} f(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d\Gamma = 1. \tag{1.5}$$

В (1.4) и (1.5) интегрирование идет по числу различных состояний $d\Gamma$, ср. с (1.2), отвечающих элементу объёма $d\varpi$, определяемому как

$$d\Gamma = \frac{d\varpi}{N! (2\pi\hbar)^{3N}}.$$
(1.6)

Здесь множитель *N*! исключает из рассмотрения тождественные микросостояния, отличающиеся перестановкой одинаковых частиц; $(2\pi\hbar)^{3N}$ представляет собой объем элементарной ячейки фазового пространства для *N* частиц.

В таком случае среднее (по ансамблю) значение некоторой величины, обозначаемой ниже как *R* и характеризующей рассматриваемую систему, может быть рассчитано по формуле

$$\langle R(\mathbf{q},\mathbf{p}) \rangle = \int R(\mathbf{q},\mathbf{p}) f(\mathbf{q},\mathbf{p}) d\Gamma.$$
 (1.7)

Заметим, что в отличие от обычной вероятности (определяемой в теории вероятностей), термодинамическая вероятность всегда не меньше единицы, т.е. $W \ge 1$.

Замкнутая система частиц с течением времени переходит в равновесное состояние, характеризуемое определенными значениями независимых от времени (и пространства) макропараметров (например, давления, объема и тем-

пературы). В этом случае, очевидно, термодинамическая вероятность постоянна (максимальна), и dW = 0. Переход системы к равновесию необратим, т.е. система не может выйти из равновесия без затрат энергии извне.

Из выражения (1.7) следует, что, зная функцию $f(\mathbf{p},\mathbf{q})$, которую еще называют функцией статистического распределения, можно найти средние значения наблюдаемых величин. Таким образом, основной задачей статистического подхода в решении тех или иных задач является нахождение статистического распределения.

Распределение Больцмана. Найдем распределение частиц по энергетическим уровням для замкнутой макроскопической системы. Для подсчета термодинамической вероятности воспользуемся так называемым *методом ячеек Больцмана*. Предположим, что для каждой частицы существует только одна ячейка. Обозначим общее число ячеек через k, а энергию, соответствующую каждой n_i ячейке, как E_i . Зная распределение частиц по ячейкам, найдем их распределение по энергиям.

При таком подходе количество микросостояний определяется N! перестановками частиц. Но, например, в одну ячейку может попасть несколько частиц. Тогда число микросостояний должно уменьшаться в $n_1!$ за счет неразличимости частиц в данной ячейке [2]. В результате, с учетом всех k ячеек, термодинамическая вероятность (или статистический вес) микросостояний определяется как

$$W = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k!}.$$
 (1.8)

Согласно принципу Больцмана, в условиях равновесия системы величина (1.8) максимальна и связана с энтропией как

$$S = k_B \ln(W), \tag{1.9}$$

где k_B – постоянная Больцмана. Для идеального газа в 1872 г. Больцман доказал H-теорему, согласно которой энтропия в необратимых процессах не убывает. В условиях равновесия энтропия максимальна (dS = 0), так что полное число частиц N и полная энергия E, определяемые как

$$N = \sum_{i=1}^{k} n_i, \quad E = \sum_{i=1}^{k} E_i n_i, \quad (1.10)$$

не меняются, т.е. $dN = \sum_{i=1}^{k} dn_i = 0$, $dE = \sum_{i=1}^{k} E_i dn_i = 0$. Для бесконечно малого изменения энтропии из (1.7) имеем:

$$\frac{dS}{k_B} = d(\ln(N!)) - \sum_{i=1}^{k} d(\ln(n!)).$$
(1.11)

Полагая число частиц в любом из микросостояний достаточно большим, из (1.11) после небольших вычислений получаем:

$$\frac{dS}{k_B} = -\sum_{i=1}^{k} \left(\ln n_i \right) dn_i = 0.$$
(1.12)

10

Далее, чтобы получить распределение частиц по энергиям, воспользуемся методом неопределенных множителей Лагранжа, который можно записать как

$$d(\ln(W)) + \alpha dN + \beta dE = 0, \qquad (1.13)$$

где α и β – некоторые параметры, относящиеся к газу в целом. Воспользовавшись выражениями для dN и dE, полученными ранее, приходим к следующему уравнению:

$$\sum_{i=1}^{k} \ln(n_i) dn_i + \alpha \sum_{i=1}^{k} dn_i + \beta \sum_{i=1}^{k} E_i dn_i = \sum_{i=1}^{k} \left[\ln(n_i) + \alpha + \beta E_i \right] dn_i = 0.$$
(1.14)

Так как $dn_i \neq 0$, то $\ln(n_i) + \alpha + \beta E_i = 0$, что дает распределение числа частиц в ячейках с энергией E_i

$$n_i = Ae^{-\beta E_i} = \frac{Ne^{-\beta E_i}}{Z},$$
 (1.15)

где $A = e^{-\alpha}$, $\beta \equiv 1/k_B T$, T – абсолютная температура газа и $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$ есть статистическая сумма состояний.

Второе равенство в (1.15) получается с учетом того, что $\sum_{i=1}^{i} n_i = N$. Из (1.15) видно ,что вероятность $W_i = n_i / N$ того что фазовая точка частицы попадет в *i*-ую ячейку имеет вид

$$W_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$$
. (1.16)

Применим формулу (1.16) к частицам чтобы рассчитать вероятность того, что частица находится в *i*-ом состоянии. В этом случае можно полагать, что соответствующая вероятность пропорциональна $e^{-\beta E_i}$, и среднее число частиц в этом состоянии есть

$$\left\langle N_i \right\rangle = A e^{-\beta E_i},\tag{1.17}$$

где нормировочный множитель А определим из условия нормировки

$$N = \sum_{i} \langle N_i \rangle = AZ, \qquad (1.18)$$

где *N* – полное число частиц. Выражение (1.17) для распределения частиц по различным состояниям в статистической физике носит название **распределения Больцмана**. Его вид представлен на рис. 1.1.

В общем случае необходимо также учитывать возможность вырождения энергетических уровней, т.е. ситуацию, при которой в энергетической ячейке имеется g_i ячеек с одинаковой энергией. В результате вместо (1.16) получим

$$W_{i} = \frac{g_{i}e^{-\beta E_{i}}}{\sum_{i}g_{i}e^{-\beta E_{i}}}.$$
(1.19)

Наконец, сделаем ряд важных замечаний относительно области применимости метода ячеек Больцмана и полученного на его основе выражения (1.17).

11

Во-первых, квантовомеханический принцип неразличимости частиц отрицает возможность их нумерации. Обмен между ячейками частиц тождественных, но по предположению с разными номерами в действительности не даст нового микросостояния. Нумерацию частиц можно проводить, если газ классический.

Во-вторых, применение формулы Стирлинга предполагает выполнение условия $N_i >> 1$ при всех *i*. Данное условие может не выполняться, если объем ячеек очень мал. Таким образом, в пределе газа, состоящего из квантовых частиц, пользоваться распределением Больцмана, вообще говоря, нельзя.

Распределение Гиббса. В статистической физике рассматривают более общую постановку вопроса, связанную с нахождением функции распределения для любого *макроскопического* тела, которое является *малой* частью (подсистемой) некоторой большой замкнутой системы. «Окружение» данного тела, являющееся внешним по отношению к нему, называется «средой», термостатом или резервуаром. Роль термостата может играть также совокупность всех других подсистем данной системы. Таким образом, задачей является нахождение функции статистического распределения для системы в термостате; ее решение и сопутствующие рассуждения можно найти, например, в [3]. В результате вероятность, определяющая статистическое распределение любого макроскопического тела W_n с энергией E_n при постоянном числе частиц, имеет аналогичный формуле (1.16) вид и носит название распределения Гиббса. Оно может быть записано в форме

$$W_n = e^{\beta(F - E_n)},$$
 (1.20)

если определить так называемую свободную энергию

$$F = -k_B T \ln(Z). \tag{1.21}$$

Выражение (1.20) позволяет рассчитать среднее (по ансамблю) значение физических величин $\langle R \rangle$ следующим образом

$$\left\langle R\right\rangle = \sum_{m} W_{n} R_{nn} = \frac{\sum_{n} R_{nn} e^{-\beta E_{n}}}{\sum_{n} e^{-\beta E_{n}}}.$$
(1.22)

В ряде случаев можно перейти от суммы к интегралу, полагая энергетический спектр системы практически непрерывным; иногда такое приближение называют квазиклассическим, полагая, что частицы газа движутся по квазиклассическим «траекториям» в фазовои пространстве. В результате для распределения Гиббса имеем

$$W(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \frac{e^{-\beta E(\mathbf{q},\mathbf{p})}}{\int e^{-\beta E(\mathbf{q},\mathbf{p})} d\Gamma},$$
(1.23)

где $E(\mathbf{q},\mathbf{p})$ – энергия системы. В квантовой статистике обобщением (1.23) является выражение для статистического оператора ρ (матрицы плотности), определяемого как

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\int e^{-\beta H} d\Gamma},\tag{1.24}$$

где *H* – Гамильтониан системы. Заметим, что выражение (1.24) «удобно» для применения также в задачах с вторичным квантованием.

В случае *переменного числа частиц* в системе, выражение (1.20) уже не может быть использовано. Для этого используется *большое каноническое распределение* Гиббса, характеризуемое распределением вероятности W_{nN} квантовых состояний с энергией E_{nN} :

$$W_{nN} = \frac{e^{-\beta(E_n - \mu N)}}{Z}, \qquad (1.25)$$

где $Z = \sum_{N} \sum_{n} e^{-\beta(E_n - \mu N)}$ – большая статистическая сумма по состояниям. Вели-

чина μ называется химическим потенциалом системы, и определяет (для идеального газа) изменение внутренней энергии системы при добавлении к ней одной частицы, при условии фиксированной энтропии и объёма. Для неидеального газа нахождение химического потенциала представляет из себя самостоятельную, иногда нетривиальную задачу.

По аналогии с (1.20) величину W_{nN} можно представить в виде $W_{nN} = e^{\beta(\Omega + \mu N - E_n)}$, где Ω – термодинамический потенциал, определяемый из условия нормировки $\sum_{N} \sum_{n} W_{nN} = 1$ в виде (ср. с (1.21))

$$\Omega = -k_B T \ln(Z). \tag{1.26}$$

Он связан со свободной энергией *F* соотношением $\Omega = F - \mu \langle N \rangle$.

Таким образом, формула (1.26) может быть использована для расчета термодинамических характеристик в задачах с переменным числом частиц, при этом среднее число частиц определяется через термодинамический потенциал (1.26) как

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}.$$
 (1.27)

1.2 Квантовая статистика идеального газа

В данном разделе нас будет интересовать термодинамически равновесный нерелятивисткий идеальный газ частиц, т.е. газ для которого потенциальной энергией взаимодействия частиц можно пренебречь.

Систему невзаимодействующих частиц можно описать числами заполнения N_i , которые указывают степень заполнения *i*-х одночастичных квантовых состояний частицами системы [3]. Значения N_i , изменяются вследствие беспорядочного движения N частиц. В связи с этим задачей является нахождение средних значений $\langle N_i \rangle$.

Рассмотрим большое каноническое распределение Гиббса (1.25), применяя его к подсистеме частиц газа, находящихся в состоянии *i*. Полагаем в (1.25) $E = n\varepsilon_i$, N = n, так как все частицы в состоянии *i* имеют одну и ту же энергию. В результате имеем:

$$W(\varepsilon, N) = \frac{e^{(\mu - \varepsilon_i)n/k_B T}}{Z},$$
(1.28)

где Z – большая статистическая сумма, принимающая вид $Z = \sum_{n} e^{\left(\frac{k_B T}{k_B T}\right)}$

Статистика Ферми-Дирака. Идеальный газ, состоящий из частиц с полуцелым спином, фермионов, называют ферми-газом; он описывается статистикой Ферми-Дирака. В квантовой физике это электроны, протоны, нейтроны и т.д. В этом случае из-за принципа Паули, в одном квантовом состоянии не может быть больше одной частицы. В таком случае суммирование производится только по двум возможным состояниям с n = 0 и n = 1, так что для термодинамического потенциала (1.26) имеем:

$$\Omega_i = -k_B T \ln\left(1 + e^{(\mu - \varepsilon_i)/k_B T}\right),\tag{1.29}$$

откуда с учетом (1.27) следует, что

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} + 1}.$$
 (1.30)

Это и есть распределение Ферми-Дирака, которому на рис. 1.1 соответствует характерная «ступенька». Нормировка для распределения Ферми-Дирака $\sum_{i} \langle N_i \rangle = N$ дает полное число частиц газа, и неявным образом определяет

химический потенциал газа как функцию от температуры газа и числа частиц. *Статистика Бозе-Эйнштейна*. Идеальный газ, состоящий из частиц с целым спином – *бозонов*, называют бозе-газом, и он описывается статистикой Бозе-Эйнштейна. В физике это фотоны, глюоны, а также квазичастицы – поляритоны в полупроводниковых микроструктурах, куперовские пары в сверхпроводнике и пр. В этом случае число частиц в любом состоянии не ограничено. Тогда выражение (1.26) представляет из себя геометрическую прогрессию, т.е. $\sum_{n} \left(e^{(\mu - \varepsilon_i)/k_BT} \right)^n = \left(1 - e^{(\mu - \varepsilon_i)/k_BT} \right)^{-1}$. В результате для среднего числа бозонов

 $\langle N_i \rangle$ в квантовом состоянии с энергией ε_i получаем:

$$\left\langle N_i \right\rangle = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}.$$
(1.31)

Формула (1.31) называется распределением Бозе-Эйнштейна для числа частиц. Оно также представлено на рис. 1.1.

На практике бывает удобным вместо $\langle N_i \rangle$ использовать число частиц $N(\varepsilon_i)$, имеющих заданное значение энергии ε_i . Связь между этими величинами имеет вид:

$$N(\varepsilon_i) = \langle N_i \rangle \omega(\varepsilon_i), \qquad (1.32)$$

где $\omega(\varepsilon_i)$ определяет число квантовых состояний с энергией ε_i . Отсюда легко определить $dN(\varepsilon)$ как число частиц с энергиями от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$, так что вместо (1.32) имеем

$$dN(\varepsilon) = \frac{d\omega}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} \pm 1},$$
(1.33)

где верхний знак относится к ферми-, а нижний к бозе-газам.

Если в (1.30) и (1.31) положить $e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} >> 1$, то распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми-Дирака переходят в классическое распределение Больцмана

$$\langle N_i \rangle \approx e^{-\frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T}},$$
 (1.34)

то есть при высоких температурах оба квантовых газа ведут себя как классический, что также видно из рис.1.1. Таким образом, существенных различий в поведении статистики газов следует ожидать при относительно низких температурах, когда газ частиц становится сугубо квантовым.

Ниже нас будут интересовать именно бозе-газы и связанные с ними свойства.



Рисунок 1.1 – Схематичные изображения для функций распределений.

1.3 Задания для практических занятий

Задание 1. Рассмотрите населенности уровней системы, состоящей из ансамбля *N* одинаковых двухуровневых частиц, разница между энергетическими уровнями которых *E*, см. рис.1.2.



Рисунок 1.2 – Двухуровневая система бозе-частиц с основным (|0>) и первым возбужденным (|1>) уровнями энергии Е. Кружками показана заселенность этих уровней в условиях равновесия.

Решение. В различных применениях квантовой теории двухуровневые системы являются упрощенной моделью для описания квантовых процессов. В физике двухуровневыми системами могут служить, например, атомы. Реальное число энергетических состояний в них может быть достаточно велико, однако с учетом экспериментальных возможностей или, как говорят, *контекста* измерения, рабочие уровни энергии подбираются под конкретную задачу, например, взаимодействия излучения с веществом [4]. В социофизике двухуровневая система – это s(social)-атом, агент, принимающие решение в определенном контексте событий типа «Да» – «Нет», «За» – «Против» и т.д., см. [5]. Относительные заселенности основного (N_0/N) и возбужденного (N_1/N) состояний имеют вид:

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{1 + e^{-E/k_B T}}, \quad \frac{N_1}{N} = \frac{e^{-E/k_B T}}{1 + e^{-E/k_B T}}.$$
(1.35)

Таким образом, в пределе низких температур, определяемого как $k_BT \ll E$, частицы преимущественно будут находиться в основном состоянии, так что $N_0 = N$, $N_1 = 0$ при T = 0. Заселение возбужденного состояния происходит при конечных (ненулевых) температурах. В пределе высоких температур $k_BT \gg E$ населенности уровней выравниваются, так что при $T \to \infty$ имеем $N_0 = N_1 = N/2$. Отсюда видно, что ни при каких (положительных) температурах инверсия населенностей (когда число частиц на верхнем уровне больше, чем на нижнем) в системе достигаться не может. Этот факт отражает физику работы лазера, для которого инверсия уровней достигается путем внешней накачки, «забрасывающей» частицы на возбужденный уровень. Однако такая система является уже не равновесной, и ей формально соответствует предел отрицательных температур.

Задание 2. Получите с помощью распределения Больцмана классическое распределение Максвелла-Больцмана по скоростям движения для атомов идеального газа с энергиями $E = p^2/2m$.

Задание 3. Докажите, что химический потенциал идеального фотонного газа (не конденсата!) равен нулю.

Задание 4. Выведите формулу Планка для излучения абсолютно черного тела и рассмотреть ее предельные случаи больших и коротких длин волн.

1.3 Вопросы и упражнения для самостоятельной работы

1. Выведите условие, при котором различные квантовые статистики совпадают.

2. Найдите число возможных размещений из *N* объектов по *m* нумерованным ячейкам с числами заполнения *n*₁, *n*₂, ...*n*_m

3. Вычислите интеграл вида $\int_{0}^{\infty} \exp(-E/k_{B}T)g(E)dE$, где $g(E) = E^{\alpha}$ и α

принимает значение 0.5, 1.5 и 2.

4. Получите формулу (1.26).

5. Покажите, что антисимметричность волновых функций для частиц с полуцелым спином приводит к принципу Паули.

6. Вычислите свободную энергию идеального бозе-газа.

7. Получите формулу (1.31).

8. Найти выражение для термодинамического потенциала Ω идеального бозе-газа.

9. Докажите, что химический потенциал μ идеального газа, подчиняющегося статистике Бозе-Эйнштейна, не положителен.

10. Как изменится распределение Больцмана, если система будет совершать движение как целое со скоростью *и*?

1.5 Литература

1. Киттель, Ч. Элементарная статистическая физика. / Ч. Киттель. – Изд-во иностранной лит-ры, 1960. – 278 с.

2. Ноздрев, В.Ф. Курс статистической физики / В.Ф. Ноздрев, А.А. Сенкевич. – Высш. школа, 1969

3. Ландау, Л.Д. Курс теоретической физики. Статистическая физика часть 1 [Электронный ресурс] : учебное пособие / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2001. — 616 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/2230. — Загл. с экрана

4. Мандель, Л. Оптическая когерентность и квантовая оптика / Л. Мандель, Э.М. Вольф. – М.: Физматлит, 2000. – 895 с.

5. Holyst, J.A. Cyberemotions: Collective Emotions in Cyberspace / J.A. Holyst. – Springer, 2016. – 317 c.

2. БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКАЯ КОНДЕНСАЦИЯ В МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

2.1 Классический и квантовый идеальные газы

Выясним условия, при которых идеальный (нерелятивисткий) газ может быть рассмотрен как квантовый или классический. Для этого обратим внимание на тот факт, что квантовые (волновые) свойства частиц газа могут быть описаны с помощью так называемой тепловой волны де Бройля, определяемой (см. [1]) как

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \qquad (2.1)$$

где p – импульс частицы. Для оценок величины импульса $p = mv_{cp}$ грубо можно использовать среднеквадратичную скорость движения частиц $v_{cp} = \left(\frac{3k_BT}{m}\right)^{1/2}$. Однако более точная формула для тепловой волны де Бройля, используемая в статистической физике, имеет следующий вид (см. напр. [2]):

$$\lambda_{dB} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{1/2}.$$
(2.2)

Важной характеристикой газа является среднее межчастичное расстояние, которое может быть оценено с помощью концентрации частиц газа *n*=*N*/*V* по формуле

$$d = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \equiv n^{-1/3}.$$
 (2.3)

Иногда выражение (2.3) в литературе именуют плотностью (числа частиц) газа. Предположим, что мы в состоянии «медленно» менять температуру газа. При достаточно высоких температурах среднее межатомное расстояние существенно больше величины λ_{dB} , см. рис. 2.1, и из (2.3) получаем оценку для классического идеального газа:

$$\frac{1}{n} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} >> 1.$$
(2.4)

В этом пределе атомы газа сталкиваются как классические упругие бильярдные шары, см. рис. 2.1а.

До сих пор в наших рассуждениях не принималась в расчет спиновая степень свободы газа. В статистической физике условие, более строгое чем (2.4), выглядит следующим образом:

$$d \gg \lambda_{dB}, \quad \frac{\xi}{n} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \gg 1, \tag{2.5}$$

где $\xi = 2s + 1 -$ число различных ориентаций спина частицы.

С понижением температуры длина волны де Бройля становится сопоставимой с межатомным расстоянием, рис 2.1 (б), т.е. выполняется условие



Рисунок 2.1 – Иллюстрация (а) классического и (б-г) квантовых газов, подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна. На рисунке показано соотношение между волной де Бройля и средним расстоянием между частицами газа, так что для (а) $d >> \lambda_{dB}$, (б) $d \approx \lambda_{dB}$, (в) $d \ll \lambda_{dB}$ (при $T=T_C$ происходит переход к БЭК) и (г) T=0, $\lambda_{dB} \to \infty$ – идеальный БЭК

$$d \approx \lambda_{dB}, \ \frac{\xi}{n} \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \approx 1.$$
 (2.6)

В этом случае будут заметны существенные отступления от законов статистики, справедливых для классического идеального газа. Очевидно, что при выполнении неравенств

$$d \ll \lambda_{dB}, \quad \frac{\xi}{n} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \ll 1, \tag{2.7}$$

квантовые эффекты в газе должны усиливаться; тепловые волны де Бройля теперь полностью перекрываются, и газ превращается в «квантовый суп» неразличимых частиц, см. рис. 2.1(в). В этом случае классическая статистика не применима. Анализ данного случая требует отдельного рассмотрения, ниже остановимся только на бозе-газах.

2.2 БЭК в трехмерном пространстве

Теоретическое обоснование эффекта конденсации ансамбля частиц, сопряженного с их переходом в низшее энергетическое состояние, восходит к работам С. Бозе и А. Эйнштейна, в которых были определены особенности статистического распределения бозонов по возможным значениям энергии системы. Когда λ_{ab} становится сравнимой с межчастичным расстоянием, газ бозонов испытывает непрерывный фазовый переход второго рода, и образуется БЭК, т.е. все частицы переходят в основное квантовое состояние, характеризуемое нулевым импульсом. При этом в координатном пространстве образуется «облако» частиц (атомов), описываемых в пределе нулевой температуры одной волновой функцией, см. рис. 2.1 (г) [3].

Важно иметь в виду, что явление БЭК существенно зависит от размерности системы. Найдем значение критической температуры образования БЭК для частиц в Евклидовом (трехмерном) пространстве. Для этого воспользуемся формулой (1.33) для статистики Бозе-Эйнштейна. Среднее число частиц в этом случае есть

$$N = \int dN(\varepsilon) = \int_{0}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{(\varepsilon_{i} - \mu)/k_{B}T} - 1}.$$
(2.8)

Выражение для $d\omega$ можно найти с учетом формул для $d\Gamma$, элемента фазового пространства $d\varpi$, применяемых к свободной частице с энергией $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ в объеме V:

$$d\omega \equiv \int_{V} d\Gamma = \int_{V} dx dy dz \frac{dp_x dp_y dp_z}{\left(2\pi\hbar\right)^3} = V \frac{4\pi p^2}{\left(2\pi\hbar\right)^3} dp.$$
(2.9)

Так как $d\varepsilon = \frac{pdp}{m}$ и $dp = \frac{\sqrt{m}d\varepsilon}{\sqrt{2\varepsilon}}$, то в общем случае с учетом спина получаем

$$d\omega = 2\pi\xi V \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = A\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon, \qquad (2.10)$$

где $A = \frac{\xi V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3}$. Отсюда для (2.8) следует, что

$$N = A \int_{0}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} - 1} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon, \qquad (2.11)$$

или, вводя обозначение $x = \varepsilon/k_{B}T$

$$N = \frac{\xi V \left(mk_B T\right)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x - \mu/k_B T} - 1}.$$
 (2.12)

Соотношение (2.12) неявно задает химический потенциал как функцию от концентрации частиц и температуры. Из (2.12) следует, что для нерасходимости интеграла необходимо, чтобы химический потенциал $\mu \le 0$. Таким образом, максимальное значение химического потенциала $\mu = 0$ достигается при некотором критическом значении температуры $T=T_C$. Подставляя $\mu = 0$ в (2.12) получаем:

$$N = A \left(k_B T_C \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1}.$$
 (2.13)

Вычисление интеграла дает

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x} - 1} = \frac{\pi^{2}}{6}.$$
(2.14)

В результате критическая температура перехода к БЭК:

20

$$T_{c} \approx \frac{3.31\hbar^{2}n^{2/3}}{\xi^{2/3}mk_{R}}.$$
(2.15)

Далее, для простоты будем полагать полагать частицы бесспиновыми, т.е. $\xi = 1$. Практически, значение критической температуры T_C в (2.15) достижимо для разреженного *ультрахолодного* газа атомов, например, при условии что $D < d < \lambda_{dB}$, где D – «диаметр» атома, d – характерное межатомное расстояние. Зависимость химического потенциала от температуры для идеального бозе-газа показана на рис. 2.2. При абсолютном нуле температур все частицы должны находиться в основном состоянии, следовательно

$$\lim_{T \to 0} \left(\frac{1}{e^{-\mu/k_B T} - 1} \right) = N.$$
(2.16)

В таком пределе химический потенциал $\mu \to -\frac{k_B T}{N}$, что, как видно из рис. 2.2, наступает существенно раньше.



Рисунок 2.2 – Зависимость химического потенциала (а) трехмерного и (б) двумерного идеального бозе-газа от температуры.

При $T < T_C$ химический потенциал расти не может, оставаясь равным нулю, и интегральная формула (2.12) этот случай не описывает. Проследим за изменением числа частиц в конденсате в этом пределе. Идея решения уравнения (2.12) предложена Бозе и Эйнштейном.

При $T < T_C$ макроскопическое число частиц занимает основное состояние, причем конденсация происходит в импульсном пространстве, когда заполняется макроскопически состояние с $\vec{p} = \hbar \vec{k} = 0$. На основании этого, общее число частиц можно представить как

$$N = N_{\vec{k}=0} + N_{\vec{k}\neq0} , \qquad (2.17)$$

где частицы с конечным \vec{k} подчиняются уже полученному выражению с Бозе-Эйнштейновским распределением

$$N_{\vec{k}\neq 0} = \int_{0}^{\infty} V \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{E_k/k_B T} - 1} = N \left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}.$$
(2.18)

Из (2.17) и (2.18) непосредственно следует, что макроскопическое число частиц в состоянии с $\vec{k} = 0$ равно

$$N_{0} \equiv N_{\vec{k}=0} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_{C}} \right)^{3/2} \right].$$
 (2.19)

Отсюда, в частности, следует, что с уменьшением температуры системы от критического значения T_c увеличивается концентрация частиц, обладающих нулевым импульсом $\vec{k} = 0$. Частицы в основном состоянии при $\vec{k} = 0$ называют Бозе-Эйнштейновским конденсатом, т.е. конденсация происходит в пространстве импульсов. Из (2.19) следует, что все частицы переходят в конденсат только при абсолютном нуле температур. Данное значение температуры практически не реализуемо, однако часто используется при описании свойств «идеального» бозе-конденсата частиц, чтобы исключить влияние частиц в надконденсатной фазе.

До сих пор речь шла о конденсации идеального газа, заданного своими переменными в трехмерном пространстве. Если же газ задан в пространстве более низкой размерности, то задача получения истинной конденсации существенно усложняется (см. ниже раздел 2.4).

Для того чтобы охарактеризовать БЭК в 2D- и 3D-случае введем энергетическую плотность состояний

$$g(\varepsilon) = \int \delta\left(\varepsilon - \varepsilon(k)\right) \frac{Vd^{D}k}{\left(2\pi\right)^{D}},$$
(2.20)

где D – размерность системы, $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$; $\delta(\varepsilon - \varepsilon(k))$ есть дельта-функция Дирака. Энергетическая плотность состояний характеризует количество состояний на единицу энергетического интервала. Тогда число частиц (2.8) можно охарактеризовать через энергетическую плотность как

$$N = \int_{0}^{\infty} \frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{e^{\left(\frac{\varepsilon-\mu}{k_{B}T}\right)} - 1}$$
(2.21)

В случае *трехмерного* газа имеем $d\omega = g(\varepsilon)d\varepsilon$ и

$$g(\varepsilon) = A\sqrt{\varepsilon} \tag{2.22}$$

В случае *двумерного* газа плотность состояний не зависит от энергии, так что

$$g(\varepsilon) = \frac{mS}{2\pi\hbar^2}.$$
 (2.23)

Можно доказать, что в общем случае однородного идеального бозе-газа плотность состояний демонстрирует следующую закономерность как функцию от размерности системы D (ср. с (2.22)):

$$g(\varepsilon) \propto \varepsilon^{D/2-1}.$$
 (2.24)

Таким образом, *необходимым условием* возникновения БЭК (в трех измерениях) является то, что энергетическая плотность пропорциональна $\sqrt{\varepsilon}$, в то время как для *двумерного* газа плотность состояний не зависит от энергии, а для *одномерного* газа и вовсе обратно пропорциональна корню из нее. Это означает, что в низких размерностях для однородного газа при конечных температурах истинной конденсации быть не может.

Для слабо взаимодействующего бозе-газа в *двух* (пространственных) измерениях возможно создание сверхтекучих фаз, которые образуются благодаря фазовому переходу Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ) [4]. Суть данного явления заключается в том, что на двумерной поверхности, ограничивающей *неидеальный* газ бозе-частиц, при температурах ниже T_{BKT} образуются «капельки» БЭК, обладающие всеми свойствами сверхтекучести, но не обладающие фазовой корреляцией. Как показывают расчёты, величина критической температуры T_{BKT} приблизительно в 4 раза меньше температуры квантового вырождения газа в этом случае.

Однако ситуацию с достижением конденсации можно существенно исправить, если газу «помочь» сконденсироваться, поместив его в специальную ловушку. В таком случае плотность состояний будет уже определяться характерными параметрами ловушки, и в таком случае возможным становится получение конденсата даже в одномерном системе, см. [5].

2.3 Особенности наблюдения БЭК в различных физических системах

В данном разделе нас будут интересовать экспериментальные аспекты получения БЭК и их сравнительные характеристики. Как это следует из (2.16), температура перехода к БЭК обратно пропорциональна массе частиц и зависит от концентрации газа. В таблице 2.1 представлены сравнительные характеристики для БЭК атомных газов щелочных металлов, а также резонаторных экситонных поляритонов. В частности, видно, что для атомов необходимым условием является достижение сверхнизких температур. Повышение температуры фазового перехода возможно а) за счет увеличения концентрации газа и/или б) малой массе частиц [6].

Вариант а) сложно осуществить на практике в широком диапазоне изменения концентрации газа, т.к. газ может просто изменить агрегатное состояние, например, перейти в жидкость.

Вариант б) более привлекателен и требует специальных методов и подходов. В частности, для достижения БЭК можно использовать квазичастицы, образованные с фотонами, которые являются «легкими» как раз за счет своей фотонной компоненты. Ниже оба варианта нами будут разобраны.

Конденсаты атомов. Как это следует из таблицы 2.1, фазовый переход к конденсации для атомного газа наступает при ультранизких температурах. При подобных условиях атомная система обладает рядом уникальных свойств, к которым можно отнести явление сверхтекучести – возможности движения квантовой жидкости без трения, см. [7].

Такой ансамбль ультрахолодных атомов представляет собой идеальный объект экспериментальной физики низких температур: среда избавлена от деструктивных возмущений при межчастичных взаимодействиях, доплеровские смещения одиночного атома сведены к минимуму, существует возможность долговременного сохранения («заморозки») начального состояния системы. Последний факт имеет непосредственное значение для проведения прецизионных экспериментов по наблюдению и детектированию квантовых систем.

Системы	Атомный газ	Резонаторные поляритоны в полупроводниковых микро- структурах					
Эффективная масса m^* / m_e^* , m_e^* – масса электрона	10 ³	10 ⁻⁵					
Боровский радиус <i>а</i> _в	0,01нм	10нм					
Расстояние между частицами $n^{-\frac{1}{D}}, D$ – размерность газа	0,1 мкм	1 мкм					
Критическая температура <i>T_C</i>	1нК – 1мкК	1K - 300K					
Время термализации/ время жизни	1мс/1с ∝10 ⁻³	(1-10пс)/(1-10пс) 0,1-10					

Таблица 2.1. Сравнительные характеристики БЭК для атомов и экситонных поляритонов , формирующихся в полупроводниковых микрорезонаторах.

В экспериментах по наблюдению БЭК атомов используется достаточно сложная установка – магнито-оптическая ловушка, вобравшая в себя все наиболее эффективные и действенные принципы охлаждения и удержания атомов. На рис. 2.3 изображена одна из первых установок для получения конденсата атомов. Существенный прогресс здесь достигнут благодаря быстрому развитию такого направления лазерной физики, как лазерное охлаждение, которое позволило на первой стадии получения БЭК существенно снизить скорость их теплового движения.

На второй стадии, когда возникла проблема долговременного удержания атомарного газа и его изоляции от разрушающего воздействия окружающей среды, был разработан целый комплекс физических средств, включающий в себя так называемые силовые (гармонические) ловушки, основной целью которых является препятствование эмиссии атомов конденсата за пределы области охлаждения и переходу в возбужденное состояние, а также технику «выпаривания», основанную на использовании радиочастотного поля для удаления наиболее «горячих» атомов из ловушки.

Таким образом, в настоящий момент достигнутый уровень температур охлажденной атомной системы составляет десятки нано-Кельвинов, а количество атомов, переведенных в состояние конденсации, измеряется десятками миллионов.

На рис. 2.4 приведены изображения, полученные для распределения по скоростям атомов рубидия при температурах до (левый рисунок) и после



Рисунок 2.3 – Одна из первых магнито-оптических ловушек для наблюдения БЭК атомов Na [8].



Рисунок 2.4. – Распределение по скоростям атомов рубидия в эксперименте с атомами натрия, полученное с помощью картины поглощения (см. [8]) и свидетельствующее о возникновении фазы БЭК. Параметром, который варьируется в эксперименте является температура газа.

конденсации (правый рисунок). Видно, что при фазовом переходе к конденсации образуется резкий пик.

Первые эксперименты по реализации БЭК в лабораторных условиях [6, 9] послужили отправной точкой для становления и развития квантовой *атомной оптики* – нового направления современной физики, объединяющего

в себе все те важные научные достижения, которые были получены за последние несколько десятков лет в области лазерной физики, квантовой оптики и атомной физики. Интерес к подобного рода системам в первую очередь обусловлен перспективами их применения для решения целого ряда прикладных задач атомной физики и квантовой оптики, а также открывающимися возможностями при исследовании неклассических состояний материи и поля. При этом следует выделить такие важные направления, как изучение волновых свойств атомных систем, коллективные процессы атомно-оптического взаимодействия, новые подходы к проблемам квантовых невозмущающих измерений, создание бозе-генераторов (бозеров) и нового класса альтернативных сверхчувствительных атомных детекторов для нужд квантовой метрологии, атомных чипов для квантовой обработки информации [10-11].

Конденсация экситонных поляритонов. Эксперименты по БЭК макроскопически большого числа атомов оказали большое влияние на развитие различных направлений современной квантовой и лазерной физики, а также новейших информационных технологий. При реализации БЭК, когда в условиях температурного фазового перехода макроскопически большое число атомов находится на основном (нижнем) квантовом уровне, формируется новое когерентное состояние вещества, обладающее ярко выраженными волновыми свойствами, см. рис. 2.4. Это проявляется в том, что, например, в предельном случае температуры T = 0 ансамбль атомов конденсата, как и каждый атом в отдельности, описывается общей волновой функцией $\Psi(r,t)$, соответствующей когерентному состоянию. В данном аспекте явление БЭК аналогично процессу лазерной генерации, когда в резонаторных схемах происходит жесткая фазовая синхронизация мод светового излучения, см., например, [12]. Замечательной особенностью таких макроскопических квантовых состояний вещества является возможность их использования для целей разработки новых физических принципов квантовой обработки и передачи информации.

Однако, несмотря на впечатляющие успехи в этом направлении, необходимость поддерживания сверхнизких температур (десятки нК) налагает принципиальные ограничения на возможность реального использования атомных конденсатов. Поскольку во многих приложениях квантовых технологий интерес представляют именно связанные квантовые состояния вещества и поля, то данная задача становится актуальной с точки зрения получения связанных макроскопических когерентных состояний вещества и поля при относительно высоких (вплоть до комнатных) температурах.

В квантовой физике существуют особые связанные состояния –поляритоны. Эти квазичастицы представляют собой суперпозицию элементарного возмущения в среде (ее поляризацию) и фотона, сильно с ней взаимодействующего [13]. В настоящее время определенный успех достигнут для полупроводниковых микроструктур – квантовых ям, помещенных в полупроводниковые микрорезонаторы, которым посвящено довольно большое количество публикаций, см., например, [14], а также рис. 2.5-2.7. На рис. 2.5 показана принципиальная схема получения такого конденсата на основе полупроводникового микрорезонатора Фабри-Перо высокой добротности. В частности, в [14] был задействован полупроводниковый CdTe/CdMgTe микрорезонатор с образцом, состоящим из 16 квантовых ям.



Рисунок 2.5 – Микрорезонатор, выполненный на основе CdTe/CdMgTe с образцом из квантовых ям, используемый в эксперименте для получения БЭК поляритонов [14].

В эксперименте регистрировалось распредление фотолюминесценции как функции от угла Θ , определяемой выражением $k_{\parallel} = (E/\hbar c)\sin\Theta$, где k_{\parallel} – составляющая волнового вектора поляритонов с энергией *E*. В условиях резонатора перпендикулярная поверхности зеркал компонента волнового вектора k_{\perp} квантуется. В то же время в параллельном к поверхности зеркал направлении, ввиду отсутствия граничных условий, существует континуум мод. Это означает, что в одномодовом режиме (одночастотном при каждом значении k_{\perp}) дисперсия поляритонов определяется лишь параллельной поверхности зеркал составляющей волнового вектора k_{\parallel} . Тогда, при условии $k_{\parallel} \ll k_{\perp}$, которое физически соответствует параксиальному приближению в оптике, дисперсионное соотношение (зависимость энергии от волнового вектора) $E_{ph}(k) = \hbar c |\vec{k}|$

$$E_{ph}(k) = \hbar c \sqrt{k_{\perp}^2 + k_{\parallel}^2} = \hbar c \left(k_{\perp} + \frac{k_{\parallel}^2}{2k_{\perp}} + O\left(\frac{k_{\parallel}^3}{k_{\perp}^2}\right) \right) \approx E_0 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{ph}}.$$
(2.25)

Здесь $k_{\perp} = \frac{\pi m}{L_{cav}}$ – квантованная составляющая волнового вектора, параллельная оси резонатора, которая соответствует периодическим граничным условиям при стандартной процедуре квантования поля; L_{cav} – эффективная

длина резонатора; число *m* соответствует выбранной моде (частоте); $m_{ph} = \frac{\hbar k_{\perp}}{c} = \frac{E_0}{c^2} - эффективная масса фотона в резонаторе.$ В микрорезонаторе поляритоны образуются при взаимодействии фотонов с экситонами, представляющими из себя электрон-дырочные пары. При этом необходимым является так называемое условие сильной связи между экситонами и квантованным полем в резонаторе, когда энергия связи среды и поля существенно больше энергии потерь на зеркалах резонатора. В этом случае дисперсионные кривые поляритонов расталкиваются, что приводит к появлению верхней и нижней ветвей экситонных поляритонов в резонаторе, см. рис. 2.6.

Принципиальной особенностью этих кривых является наличие «потенциальной» ямы (для $\vec{k} = 0$), где и образуется экситон-поляритонный конденсат. Ее ширина определяет угловые параметры, которые будет иметь поляритонный пучок в резонаторе.



Рисунок 2.6 – Верхняя и нижняя дисперсионные кривые экситонных поляритонов в микрорезонаторе. Пунктиром показаны дисперсии экситонов и фотонов по отдельности.

Выражение (2.25) играет важную роль при описании конденсата экситонных поляритонов: именно благодаря появлению эффективной массы у фотона в резонаторе поляритоны приобретают свою массу, которая в условиях резонансного взаимодействия «вещество-поле» лишь в 2 раза больше фотонной, т.е. $m_{pol} = 2m_{ph}$, что на много порядков меньше массы атомов. Это и позволяет надеяться на получение высокотемпературной конденсации вплоть до комнатных температур.

С практической точки зрения нас интересуют экситонные поляритоны нижней дисперсионной ветви, для которых вблизи минимума дисперсия квадратична по импульсам, т.е. $E_{pol}(k) \approx \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m_{pol}$, см. рис. 2.6; в результате поляритоны в резонаторе представляют собой двухмерный бозе-газ.

В общем случае описание и получение в эксперименте экситон-поляритонного конденсата, довольно деликатная и сложная задача, решение которой требует «чистых» полупроводниковых образцов. Детали и подходы к решению данной задачи, изложены, например, в [15]. В частности, для полупроводниковых структур характерное время жизни фотона в резонаторе достаточно мало и составляет порядка 10⁻¹²–10⁻¹¹ с, см. табл. 2.1. Кроме того, проблема наличия примесей в образце, от которых вряд ли удастся полностью избавиться в ближайшее время в рамках существующих технологий, играет весьма негативную роль с точки зрения получения макроскопического конденсата поляритонов и его использования в широких масштабах, например, для целей обработки квантовой информации.

В отличие от атомных конденсатов, экситон-поляритонные конденсаты не равновесны или, в лучшем случае, квазиравновесны. Управляющим параметром здесь является концентрация частиц, которую можно менять в эксперименте за счет внешней (оптической) накачки; при этом считается, что температура остается фиксированной. Такая постановка задачи делает ее достаточно близкой к «обычному» лазеру; экситон-поляритонный конденсат называют еще поляритонным лазером. Однако в «обычном» лазере, как это уже обсуждалось в разделе 1.3, необходимым условием является инверсия населенностей, которую создает накачка. Здесь система принципиально безынверсионная. Хотя данные состояния и нельзя считать конденсатом в строгом термодинамическом смысле из-за неравновесного состояния системы в целом, однако при определенных условиях, налагаемых на характер реализуемых взаимодействий, экситонные поляритоны действительно могут конденсироваться: их распределение удовлетворяет функции распределения Бозе-Эйнштейна для газа бозонов, см. [3], а также рис. 2.7.

На рис. 2.7 изображена Бозе-конденсация экситонных поляритонов в микрорезонаторе, экспериментально достигнутая в [14]. Управляющим параметром в данном эксперименте служила мощность оптической накачки, манипулируя которой, экспериментаторы могли управлять концентрацией квазичастиц при неизменной температуре. Из рисунка видно, как с ростом накачки поляритоны оккупируют низшее энергетическое состояние, соответствующее нижней дисперсионной ветви, при этом образуется резкий пик по энергии и направлению. А именно, при достижении пороговой мощности $P_{th} = 1,67 \ \kappa Bm \ / \ cm^2$ (средний рисунок) большая часть выходного излучения приходится на пик, представляющий собой когерентное излучение, направленное по нормали к зеркалу микрорезонатора.

В общем случае наблюдение фазовых переходов системе экситон-поляритонов связано с двумя важными обстоятельствами, на которые следует обратить внимание.

Во-первых, благодаря экситонной компоненте поляритоны взаимодействуют между собой. Это означает, что даже в отсутствие ловушки возможна так называемая их квазиконденсация, которая происходит в результате фазового перехода БКТ к сверхтекучему состоянию двумерных бозе-систем, и для которых истинная бозе-эйнштейновская конденсация (в отсутствии удержания частиц газа в ловушке) невозможна, см. [4].

Во-вторых, в реальности пучок накачки образца ограничен и оказывается возможным создать ловушку разными технологическими способами, и тогда задача получения истинной конденсации упрощается, см. например [6].



Рисунок 2.7 – Экспериментальное свидетельство Бозе-конденсации экситон-полритонов, см. [14]. Критическая температура $T_c = 19K$, двумерная концентрация $n_2 = 5 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$; Θ – угол фотолюминесценции (подробности см. в тексте).

2.4 Задания для практических занятий

Задание 1. Рассмотрите образование конденсата в двумерном пространстве.

Решение. Рассмотрим возможность формирования конденсата в двумерном пространстве. С практической точки зрения это может быть конденсат «на пленке», или ультратонкая «лепешка», полученная путем «сплющивания» конденсата в трехмерном пространстве за счет подбора характерных частот ловушки.

В данном случае, соотношение между средним числом частиц *N* и химическим потенциалом µ дается формулой [6]

$$N = \int_{0}^{\infty} \frac{2\pi Skdk}{(2\pi)^{2}} \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{k} - \mu}{k_{B}T}\right) - 1},$$
(2.26)

где *S* – площадь поверхности. Тогда, простые расчеты дают следующее определение химического потенциала.

$$\mu = -k_B T \ln \left[\frac{1}{1 - e^{-n\lambda_{dB}^2}} \right],$$
(2.27)

где n = N/S – плотность газа в 2D пространстве. Причем выражение (2.27) справедливо для любых температур и плотностей.

Рассмотрим случай, когда $n\lambda_{dB}^2 << 1$, что соответствует классическому газу. Тогда

$$\mu = -k_B T \ln\left(\frac{1}{n\lambda_{dB}^2}\right). \tag{2.28}$$

В другом предельном случае (квантовый газ), когда $n\lambda_{dB}^2 > 1$, мы имеем

$$\mu = -k_B T e^{-n\lambda_{dB}^2}.$$
(2.29)

Таким образом, мы видим, что химический потенциал непрерывно уменьшается с температурой и всегда остается конечным, что говорит об отсутствии БЭК.

Задание 2. Покажите, что в случае 2D идеального Бозе-газа, удерживаемого в ловушке с гармоническим потенциалом $V(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$, феномен БЭК существует.

Задание 3. Найдите химический потенциал одномерного идеального газа.

Задание 4. Основываясь на теории резонаторных экситонных поляритонов, можно показать, что их энергия для нижней поляритонной ветви имеет вид, см. рис. 2.6:

$$E = \frac{1}{2} \Big(E_{ph}(k) + E_{ex} - \sqrt{\Delta^2 + 4k^2} \Big),$$
(2.30)

где $E_{ph}(k)$ – энергия фотонов в резонаторе дается формулой (2.26), E_{ex} – энергия экситонов, $\Delta = E_{ph}(k) - E_{ex}$ – отстройка от резонанса, зависящая от волнового вектора k и κ – коэффициент связи экситонов и квантованного поля.

В пренебрежении дисперсией экситонов, т.е. полагая $E_{ex} = const$, найдите эффективную массу поляритонов нижней дисперсионной ветви и исследуйте ее поведение в зависимости от величины и знака отстройки $\delta = E_0 - E_{ex}$, не зависящей от волнового вектора *k*. Объясните полученные результаты.

2.5 Вопросы и упражнения для самостоятельной работы

1. Оцените величину тепловой волны де Бройля а) для атомов с массой 10⁻²⁶ кг, б) электронов, взятых при комнатной температуре в 300К.

2. Почему в реальном бозе-конденсате импульсы частиц не равны нулю?

3. Почему при температурах ниже критических нельзя пользоваться выражением (2.11) для числа частиц *N* ?

4. Рассчитайте интеграл $\int_{0}^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x} - 1}$.

5. Почему для двумерного идеального газа условием его квантового

поведения является $n\lambda_{dB}^2 > 1$, а не $n\lambda_{dB}^3 > 1$?

6. Получить выражение для химического потенциала идеального двумерного газа (2.27).

2.6 Литература

1. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика Т.З. Квантовая механика (нерелятивистская теория) [Электронный ресурс] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2001. — 808 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/2380. — Загл. с экрана

2. Хуанг, К. Статистическая механика / К. Хуанг. – М.: Мир, 1966. – 521 с.

3. Ландау, Л.Д. Курс теоретической физики. Статистическая физика часть 1 [Электронный ресурс] : учебное пособие / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2001. — 616 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/2230. — Загл. с экрана

4. Jose, J. V. 40 Years of Berezinskii - Kosterlitz - Thouless Theory / J.V. Jose. – Singapore: World Scientific, 2013. – 351c.

5. Chestnov, I.Yu. Bose-Einstein condensation for trapped atomic polaritons in a biconical waveguide cavity / I. Yu. Chestnov, A. P. Alodjants, S. M. Arakelian, J. Klaers, F. Vewinger and M. Weitz //Pys. Rev. A. -2012. -T. 85. -c. 053648

6. Proukakis, N. Universal Themes of Bose-Einstein Condensation / N. Proukakis, D. Snoke and P. Littlewood. – Cambridge: Cambridge University Press. -2017. -649 c.

7. Ландау, Л.Д. Курс теоретической физики. Статистическая физика, часть 2, Теория конденсированного состояния [Электронный ресурс]: учебное пособие / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2004. — 496 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/2235. — Загл. с экрана

8. Кеттерле, В. Когда атомы ведут себя как волны. Бозе-эйнштейновская конденсация и атомный лазер / В. Кеттерле // Успехи физических наук. – 2003. – Т. 173. – №. 12. – с. 1339

9. Anderson, M.H. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor / M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell // Science. – 1995. – T. 269. – c. 198-201

10. Folman, R. Material science for quantum computing with atom Chips/ Ron Folman // Quantum Inf. Process. – 2011. – T. 10. – c. 995-1036

11. Bloch, I. Measurement of the spatial coherence of a trapped Bose gas at the phase transition / I. Bloch, T.W. Hansch and T. Esslinger // Lett. to Nature. -2000. - T. 403. - c. 166-170

12. Ораевский, А. Н. Бозе-конденсаты с точки зрения лазерной физики / А.Н. Ораевский // Квант. Электроника. – 2001. – Т. 31. – с. 1038-1057

13. Брандт, Н.Б. Квазичастицы в физике конденсированного состояния [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.Б. Брандт, В.А. Кульбачинский. — Электрон. дан. — Москва : Физматлит, 2010. — 632 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/59598. — Загл. с экрана

14. Kasprzak, J. Bose–Einstein condensation of exciton polaritons / J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. M. J. Keeling, F. M. Marchetti, M. H. Szymańska, R. André, J. L. Staehli, V. Savona, P. B. Little-wood, B. Deveaud and Le Si Dang // Nature. – 2006. – T. 443. – c. 409-414

15. Kavokin, A.V. Microcavities / A.V. Kavokin, J.J. Baumberg, G. Malpuech and F.P. Laussy. – Oxford University Press. – $2017. - N_{2} 21. - 591$ c.

3. ГЕНЕРАТИВНЫЕ МОДЕЛИ СЕТЕВЫХ СТРУКТУР

Наиболее замечательным свойством описанных выше методов и подходов статистической физики и статистической механики является возможность их применения к проблемам за пределами физики, в частности, к современным задачам динамического роста сетевых структур. Впервые на это было обращено внимание в работах Барабаши [1,2]. Хотя эти работы не позволяют в точности оценить количественные процессы, происходящие в реальных сетевых структурах, на их основе становится возможным понимание качественных преобразований и, в частности, фазовых переходов и превращений, происходящих в социальных сетях. Перед тем, как привести результаты по статистической физике динамического роста сетевых структур, вспомним элементы из теории графов, которые будут полезны для дальнейшего обсуждения.

3.1 Элементы теории графов

В современных исследованиях сложных сетевых структур теория графов является тем естественным математическим инструментом, без которого данное направление сложно представить. Под *обыкновенным* графом *G* понимают математический объект, состоящий из (непустого) множества *n* вершин $P = \{p_1, p_2...p_n\}$ и (непустого) множества ребер $A = \{a_1, a_2...a_n\}$, см. напр., [3]. Граф полностью определяется упорядоченной парой множеств *P*,*A*: *G*=(*P*,*A*). Очевидно, что в данном графе *G* сумма степеней всех его вершин является четным числом, равным удвоенному числу ребер графа:

$$\sum_{i=1}^{n} p_i = 2a.$$
 (3.1)

Например, при описании сети Интернет в виде графа, его вершинами будут веб-страницы, а ребрами – ссылки между ними.

Граф называется *полным*, если любые две различные его вершины соединены ребром, и он не содержит параллельных ребер, см. рис. 3.1. Дополнением графа \overline{G} называется граф с теми же вершинами, что и граф G, содержащий только те ребра, которые нужно добавить к графу G, чтобы получился полный граф. Граф G называется *плоским*, если он может быть изображен на плоскости так, что все пересечения ребер являются его вершинами. Граф G_1 , изображенный на рис. 3.1, не является плоским.

Если ребрам графа приданы направления от одной вершины к другой, то такой граф называется *ориентированным*, см. рис. 3.2. Ребра ориентированного графа называются *дугами*. Соответствующие вершины ориентированного графа называют *началом* и *концом*. Если направления ребер не указываются, то граф называется *неориентированным* (или просто графом).

Граф, имеющий как ориентированные, так и неориентированные ребра, называется *смешанным*, см. рис. 3.3, а содержащий кратные ребра, называется

мультиграфом. Неориентированное ребро графа эквивалентно двум противоположно направленным дугам, соединяющим те же самые вершины.

Ребро может соединять вершину саму с собой; такое ребро называется *петлей*.

Вершины графа являются *инцидентными* ребру *a*, если эти вершины соединены *a*. Две вершины называются *смежными*, если они инцидентны одному и тому же ребру. Два ребра называются *смежными*, если они имеют общую вершину.



Рисунок 3.1 – Пример полного и дополненного графа. Граф G₁ – полный граф, состоящий из двух дополненных графов так, что G₁= G₂+ G₃



Рисунок 3.2 – Ориентированный (справа) и неориентированный (слева) графы.

Степенью вершины графа k_i называется число ребер, инцидентных этой вершине; если есть петли, то они учитываются дважды. Вершина, имеющая степень 0, называется изолированной, а степень 1 – висячей. Средняя степень вершин графа определяется как

$$\left\langle k\right\rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} k_i \,. \tag{3.2}$$

Весом вершины называют действительное число, которое ставится в соответствие данной вершине (обычно используется при решении практических задач).

Чередующаяся последовательность вершин и ребер в графе G называется *путем*. Если путь замкнут, и ребра в нем не повторяются, то такой путь является еще и *циклом*. Граф *G* называется *связным*, если между любой парой его вершин существует как минимум один путь, т.е. такой граф содержит только одну компоненту связности. Компонента связности графа – это его максимальный связный подграф.



Рисунок 3.3 – Смешанный граф, ү4 и ү5 – параллельные ребра, ү2 – петля. Вершина р3 и ү3 инцедентны друг к другу, р1 и р2 – смежные вершины, ү1 и ү3 – смежные ребра, р4 – висячая вершина, р5 – изолированная вершина

Диаметром (неориентированного) графа G называется максимальная длина кратчайшего пути между двумя вершинами. В 1969 году американские психологи Стэнли Милгрэм и Джеффри Трэвер выдвинули гипотезу о том, что каждый человек на планете Земля может «достучаться» до любого ее жителя через цепочку общих знакомых, состоящую в среднем из пяти человек (*meopus шести рукопожатий*). Данная теория в целом верно отображает статистику взаимодействий во всемирной «паутине».



Рисунок 3.4 – Схематическое изображение теории шести рукопожатий на графе. Агенты А и В (занимающие зеленый и красный вершины графа, соответственно) связаны между собой пятью промежуточными агентами.

Альтернативным способом задания графа является *матрица смежно*сти $A = (a_{ij})$ – квадратная матрица порядка *n*, где *n* – число вершин. Каждый элемент матрицы смежности

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, \ ecnu \ i - a \pi \ u \ j - a \pi \ вершины \ смежны; \\ 0, \ ecnu \ эти \ вершины \ не \ смежны. \end{cases}$$
(3.3)

Стоит отметить, что в отсутствие у графа петель диагональные элементы матрицы смежности равны нулю.

Матрицей инцидентности $B = (b_{ij})$ ориентированного графа называется прямоугольная матрица ($n \times m$), где n – число вершин, m – число ребер, у которой

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, p_i - ha \lor a \land o _ \partial y \land u _ a_j; \\ -1, p_i - \kappa \circ h \land u _ \partial y \land u _ a_j; \\ 0, p_i - h \land e _ uh \lor u \partial \land d \lor e _ a_j. \end{cases}$$
(3.4)

Для неориентированного графа имеем

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, p_i - uhuudehma_peby_a_j; \\ 0, p_i - heuhuudehma_peby_a_j. \end{cases}$$
(3.5)

Два графа $G_1 = (P_1, A_1)$ и $G_2 = (P_2, A_2)$ являются *изоморфными*, если существует взаимно однозначное соответствие между множествами вершин P_1 и P_2 такое, что любые две вершины одного графа соединены тогда и только тогда, когда соединены соответствующие вершины другого графа, см. рис.3.5.



Рисунок 3.5 – Изоморфные графы

В данной работе нас будут интересовать сложные (комплексные) сетевые структуры, образованные случайными графами, в основе создания, которых лежат случайные процессы, описываемые распределениями вероятности.

3.2 Функция распределения степеней узлов в сетях

Перейдем теперь к рассмотрению сетевых структур, которые представляют из себя практическую реализацию теории графов.

Сети – это топологические структуры, которые используются для описания самых разнообразных систем, таких как Интернет, головной мозг или квантовая структура пространства-времени. Одним из частных, но актуальных примеров сетей является социальная сеть – структура, узлы которой представлены акторами – людьми или организациями, а связи между узлами – их социальными взаимодействиями. Приведем несколько моделей сетей, существование которых обосновано эмпирически; эти модели в дальнейшем будут нам полезны.

Если сеть обладает нетривиальными топологическими свойствами, то говорят о *сложной cemu* (*complex network*). Сложными сетями являются сеть «Интернет», сети научных цитирований, социальные сети. Несмотря на довольно разную специфику этих сетей, на практике оказывается, что у них есть вполне определенные общие свойства, изучению которых посвящено уже много работ, см., например, [4,5]. Вместе с тем, в настоящее время устоявшейся и полезной для понимания сути вещей является модель Барабаши-Альберт, касающаяся описания так называемых безмасштабных сетей с механизмом предпочтительного присоединения.

Важной характеристикой сложных сетевых структур является так называемое распределение степеней вершин. Не все вершины в графах имеют одинаковое количество ребер. Распределение степеней вершин графов характеризуется функцией распределения P(k) [1], которая характеризует количество ребер k у случайно взятой вершины. Пусть k_i – степень i-й вершины, т.е. число ее ближайших соседей, $k_i=1,2...k_{max}$, а n_k – число вершин со степенью k, т.е. $n_k = \sum_i I(k_i == k)$. Тогда распределение степеней вершин, доля вершин со степен

нью k, асимптотически определяется как:

$$P(k_i == k) = P(k) = \frac{n_k}{\sum_k n_k} = \frac{n_k}{n},$$
(3.6)

где $n = \sum_{k} n_{k}$ – общее число вершин.

В случайном графе ребра располагаются случайным образом, большинство вершин графа будут иметь примерно одинаковую степень, близкую к средней степени $\langle k \rangle$. Генерация случайного графа может быть описана алгоритмом Эрдёша-Реньи [6]; подробнее алгоритмы генерации сложных сетей обсуждаются в разделе 3.4. Случайный граф имеет пуассоновское распределение степеней вершин, см. рис. 3.6. Однако при исследовании сложных сетей было обнаружено, что их распределение зачастую значительно отклоняется от распределения Пуассона [1] и имеет «тяжелый» степенной хвост вида (см. рис. 3.6):

$$P(k) \sim k^{-\gamma}, \tag{3.7}$$

где γ ∈ [2,3]. Тем не менее, стоит отметить, что сложные сети все же могут быть случайными, см., например, [7].

Среди параметров, характеризующих сложные сети, есть параметр диаметра сети. Как было показано Б. Боллобашем и О. Риорданом в [8], диаметр достаточно сложных сетей (графа) может быть аппроксимирован выражением $\ln N / \ln(\ln N)$, где N – число вершин в графе. Такая зависимость, фактически, подтверждает принцип «шести рукопожатий», о котором речь шла выше. Еще одной важной характеристикой сложной сети является коэффициентов кластеризации, который является усреднением локальных коэффициентов кластеризации узлов сети, описывающих взаимодействие между собой ближайших соседей для данного узла. Предположим, что *i*-ый узел сети содержит k_i число связей. Они соединяют его с другими узлами, количество которых есть k_i . Максимальное число связей, которое может существовать между этими узлами (исключая данный) есть $K_i = k_i(k_i - 1)/2$. В реальной сети число связей может отличаться от K_i , предположим, что это число \overline{K}_i . Тогда под локальным коэффициентом кластеризации следует понимать величину $C_i = \overline{K}_i / K_i$. Таким образом, коэффициентом кластеризации сети является величина $C = 1/N \sum_{j=1}^{N} C_i$, где N – число узлов сети. Регулярные, упорядоченные сети, например, кристаллические решетки в физике, имеют высокие коэффициенты кластеризации, в то время как случайные сети – малые.



Рисунок 3.6 – Распределение степеней узлов у случайной и безмасштабной сети.



Рисунок 3.7 – Распределение степеней узлов для реальных сетей: (а) Интернет на уровне маршрутизатора; (б) коллаборативная сеть киноактёров; (в) сеть соавторов физиков, работающих в физике высоких энергий; (г) сеть соавторов нейробиологов. [1]

Таким образом, исходя из распределений степеней узлов и иных характеристик сложных сетей, можно выделить следующие их характерные типы.

Случайная сеть – сеть с нормальным распределением степеней узлов. Это значит, что в такой сети есть небольшое количество узлов с малым числом связей и небольшое количество узлов с очень большим числом связей, а большинство узлов имеют среднюю связанность, см. рис. 3.8(а). Случайная сеть образуется в том случае, если узлы сети неразличимы, или «температура» сети слишком высока. Смысл «температуры» с точки зрения описания генерации сетей обсуждается далее. В любом случае это приводит к равновероятному присоединению нового узла к любому другому узлу.

Безмаситабная сеть – сеть с экспоненциальным распределением степеней узлов. Это значит, что в такой сети есть небольшое число «богатых» узлов, содержащих очень большое число связей, а большинство узлов слабосвязаны, см. рис. 3.8(б). Богатые узлы иначе называются хабами. Безмасштабные сети образуются в том случае, если узлы сети имеют разные веса, а эффективный параметр «температуры» сети достаточно мал, чтобы это различие влияло на вероятность присоединения. В таком случае, большинство связей достанутся не более старому узлу, а узлу с наибольшим весом. В качестве веса узлов часто используется термин «полезность» (в англоязычной литературе «*fitness*»). Смысл полезности зависит от системы, описываемой сетью; это может быть релевантность web-страницы запросам пользователя или предпочтение покупателями тех или иных брендов. Как будет видно ниже, с точки зрения фазовых переходов безмасштабная сеть соответствует бозе-конденсату, реализуя принцип «богатые богатеют».



Рисунок 3.8. (a) – случайная сеть, (б) – безмасштабная сеть, и (в) – сеть малого мира, ср. с [6]

Сеть малого мира (англ. Small World) – сеть, которой соответствует граф «мир тесен», и в которой два произвольные узла, с большой вероятностью не будут смежными, однако диаметр такой сети невелик, в том смысле, что достичь любого узла из любого другого можно за небольшое количество шагов (принцип «шести рукопожатий»), см. рис. 3.8(в). Характерное расстояние между двумя произвольно выбранными узлами сети малого мира увеличивается пропорционально логарифму от числа узлов *N*. Сеть малого мира является «переходной» от случайной сети к упорядоченной, например, к безмасштабной. Такая сеть характеризуется высокой кластеризацией и наличием большого количества хабов, каждый из которых связан с другими хабами и некоторым количеством прочих узлов.

3.3 Предпосылки применения квантовой теории к социальным системам

Элементы общества. Широко распространено мнение, что невозможно описать или рассчитать заранее поведение человека с помощью математических моделей или с помощью физических методов и подходов. Человек как индивид – нечто большее, чем просто набор, например, атомов и молекул. Отчасти это так: ни одно уравнение не может исчерпывающе описать поведение отдельно взятого человека, имеющего свою систему ценностей, идеалов, устремлений и пр. Люди отличаются культурными, национальными, ментальными особенностями, уровнем образования и мировосприятия. Однако, несмотря на все различия, в тех или иных ситуациях люди часто ведут себя «рационально», или наоборот «нерационально». Эти ситуации связаны с принятием решений, от которых зависит последующая «жизненная траектория». В ряде случаев задачи принятия решения, несмотря на все их разнообразие, удается математически формализовать; такое направление в математике называется теорией игр и имеет множество приложений в экономике, финансах, политических науках и т.д. [9]. В рамках данной науки исследуются математически выверенные стратегии поведения как отдельно взятого индивида, так и множественных групп в различных задачах, моделирующих общественные, экономические, политические и пр. отношения между людьми. Несмотря на всю разнообразность человеческих характеров, как показывает анализ, стратегии их поведения зачастую могут быть вполне универсальными. В этом смысле уместно говорить об агентах, как элементах социальных систем. Особенно ярко определенные поведенческие свойства проявляются в социальных сетях, таких как Фейсбук, Твиттер, Инстагам, ВКонтакте и пр., которые уже стали неотъемлемой частью нашей жизни, см. рис. 3.9.

Для стороннего наблюдателя агенты сети являются отражением того, как эти агенты воспринимаются другими, и определяются набором некоторых характеристик. Формально, если создать набор из бесконечного количества характеристик, можно смоделировать реальную личность, однако, разумеется, сделать это не возможно, да и не нужно. В реальной ситуации принятие решения осуществляется путем выбора между двумя – тремя возможными исходами, а «бесконечное число внешних факторов» представляет некоторую неопределенность ситуации, в которой осуществляется принятие решения.



Рисунок 3.9. – (а) Организация Интернет- трафика. [10]; (б) политическая блогосфера, США ,2004г. (синий цвет – либералы, красный – консерваторы) [11].

По своей сути такая постановка задачи делает малоприменимыми методы классической (колмогоровской) теории вероятностей, работающей с большими множествами элементов (событий). В последнее время показано, что поведение индивида более правильно описывать квантовым формализмом, т.е. на основе квантовых вероятностей [12]. Таким образом, проводя аналогии с квантовой физикой, можно полагать, что на низшем, микроскопическом уровне это поведение отдельно взятых агентов, для которых остальные агенты их группы выступают в роли «окружающей среды». Например, в социальных сетях в этом случае важно учитывать наличие собственных мнений агентов, а также изменение этих мнений, под влиянием «окружающей среды» – других членов социальной сети [13]. Следует также различать степень подверженности агентов внешнему влиянию (степень их конформизма, устойчивость мнений и т.д.). Разумеется, такие исследования в первую очередь должны учитывать когнитивные особенности агентов, устройство их ментального состояния. На данном уровне поведения квантовые модели являются наиболее полными и адекватными, т.к. способны в полной мере учесть дискретный характер ментальной системы агента сети и ее результатов в ходе обмена информацией.

В настоящее время поведение агентов принято описывать с помощью модели так называемых s-атомов (social atoms), обладающих дискретными уровнями ментального состояния, ср. с [14]. Данное описание делает возможным не только рациональные решения, которые принимает агент, но и нерациональные (спонтанные), по аналогии с «обычными» атомами в квантовой оптике.

Группа – это некоторое количество агентов, обладающее общей качественной характеристикой. Групповая характеристика часто связана с некими знаками отличия. Например, женщины и мужчины носят разную одежду, полицейские и врачи – разную униформу, иностранцы говорят с особым акцентом, чернокожие заметны в толпе белокожих людей и т.п. В толпе людей замечается очень мало индивидуальных качеств, а все индивиды в таком случае могут быть описаны всего несколькими характеристиками. Эти характеристики могут быть количественными и качественными. Количественные характеристики (высокий, быстрый, сильный, богатый) присущи классам, тогда как качественные (женщина, чернокожий, мусульманин, индиец) присущи группам.

В известной работе М. Грановиттера [15] учитывались связи между микрои макро-уровнями в социологии: впервые обсуждалось, каким образом могут быть организованы связи, по которым в обществе может распространяться социально значимая информация (слухи, возмущения, и пр.) между различными группами. При этом предполагалось, что в социальных сетях существуют сильные и слабые связи. Сильные связи образуются между людьми, которые постоянно взаимодействуют в силу общности интересов: совместного проживания (близкие родственники), работы (члены трудовых коллективов), отдыха или времяпровождения (товарищества жильцов, болельщики спортивных команд и т.д.). Слабые связи носят эпизодический (неустойчивый) характер и образуются между людьми разных малых групп, не имеющих общих интересов, требующих постоянного общения: дальние родственники, одноклассники/однокурсники, и т.д. Между различными группами существуют локальные мосты слабой связи. Таким образом, исследование распространения информации можно свести к трем базовым уровням, которые в физике имеют вполне однозначные аналоги.

В квантовой теории группы, содержащие относительно небольшое число элементов, соответствуют так называемому мезоскопическому уровню организации сложных систем, которые содержат большое число частиц, но их поведение может существенным образом зависеть от поведения (квантового состояния) одной или нескольких частиц [16]. Например, в социальных сетях это, как правило, группы «по интересам», с близкими мнениями, и пр. подчиняющиеся специфическим социальным нормам. На данном уровне организации важное значение имеет исследование эффекта кластеризации (чем выше плотность связей активных агентов-соседей, тем больше вероятность активизации связанного с ними агента). Можно также сказать, что это группы, относящиеся к сильной связи. В социальных сетях на данном уровне организации необходимо учитывать различную значимость мнений (влиятельности, доверия) одних агентов для других агентов, существование «лидеров мнений» (агентов с максимальным «влиянием»), существование косвенного влияния в цепочке социальных контактов. Очевидно, что в целом такая сеть имеет малый диаметр, т.е. имеется короткая цепочка распространения мнения в сети. Здесь интерес представляет исследование эффекта уменьшения косвенного влияния с увеличением «расстояния» между агентами. В организации сети важным является также выявление порога чувствительности к изменению мнения окружающих.

Наконец, на более высоком, *макроскопическом уровне* – уровне социальной организации, мы имеем дело с ансамблем «почти одинаковых» систем, содержащим очень больше число элементов. На данном уровне уместным как раз оказывается применение подходов статистической физики.

Статистический подход не применяется к отдельно взятым личностям, он применяется только к большим группам людей. В больших группах индивидуальные качества уходят на «второй план», и их место занимают групповые характеристики. К примеру, в социальной экономике анализируются огромные системы, такие как население городов, государств или континентов. Толпа состоит из незнакомых друг другу людей: лишь некоторые внешние атрибуты (лицо, цвет кожи, волосы, одежда, язык) дают небольшое представление о расе, поле, происхождении и религиозной принадлежности владельца. Только этими внешними атрибутами и определяется взаимодействие людей в больших группах. Зачастую времени на проверку достоверности этих сведений недостаточно, поэтому группы людей подвержены стереотипизации: американские туристы богатые, японские рабочие занятые, израильские бизнесмены умные, итальянские мужчины обворожительные и т.п. Эти обобщенные характеристики приписываются группам людей теми, кто в них, как правило, не входит и не важно, верны эти характеристики или нет. Это называется «атомизация» социальных взаимодействий. Таким образом, в роли элементов социально-экономических систем выступают не люди, а агенты (s-атомы) с определенными и очевидными параметрами.

При статистическом подходе свойства отдельных агентов усредняются и на первый план выходят параметры группы в целом. Однако на данном уровне организации социума (например, в социальных сетях) уместно говорить о квантовых эффектах, связанных с квантовой статистикой газа s-атомов – статистикой Бозе-Эйнштейна или Ферми-Дирака, которые в частности могут проявляться на макроскопическом уровне в виде различных фазовых переходов (перестройки социальной сети, например). Процессы такой структурной перестройки происходят как вследствие внутренних факторов взаимодействия агентов или групп (эффект квантового (нелинейного) рассеяния частиц в квантовой физике), так и внешних факторов «информационной накачки», см. мосоциального лазера, которого дель В основе лежит понятие s-атома, взаимодействующего с квантованным излучением (информацией, распространяемой в сети).

Ниже нас будут интересовать в основном квантовые модели организации социальных процессов. Однако, как известно из квантовой теории, любая такая модель должна содержать в качестве частного случая предельный переход к классическому поведению.

3.4 Генерация сетевых структур в модели Бианкони-Барабаши

Общим свойством сложных сетевых структур является их нестатичность. Согласно современным вероятностным генеративным моделям сетевых структур, в каждый момент времени к существующей сети добавляется N новых узлов, которые образуют M новых связей с существующими узлами. Выбор новым узлом существующего узла для связи определяется вероятностным алгоритмом, при этом основной характеристикой узлов является их «полезность» (в англоязычной литературе «fitness»). Чем выше полезность узла сети, тем с большей вероятностью он создаст связь с новым узлом.

Одним из популярных алгоритмов генерации сетей является алгоритм Барабаши-Альберт. Согласно данному подходу вероятность присоединения к узлам определяется не только их полезностью, но и их текущей связанностью. Такой подход хорошо отражает генерацию социальных сетей, когда пользователи при прочих равных условиях предпочитают дружить с теми, у кого больше друзей, либо предпочтение потребителей приобретать товары и услуги у крупных компаний с большой клиентской базой. На рис. 3.10 показана сеть, сгенерированная по алгоритму Барабаши-Альберт. Узлы с наиболее высокой связностью расположены в центре.

Задачей алгоритма Барабаши-Альберт является описание генеративных процессов, действующих на уровне отдельных узлов и формирующих в конечном итоге кумулятивный эффект, который определяет конечную структуру всей системы. Речь, в частности, идет об описании таких механизмов как (а) непрерывный рост сети за счет добавления новых узлов и (б) предпочтительное присоединение узлов с учетом того факта, что новый узел с большей вероятностью связывается с узлами, уже имеющими большое количество связей.



Рисунок 3.10 – Сеть, размером N=200, смоделированная, по алгоритму Барабаши-Альберт, с $\langle k \rangle = 6$, см. [17].

На рубеже XX-XXI в.в. А. Барабаши и Г. Бианкони предложили моделировать сложные сети методами статистической физики и статистической механики. Предложенная ими модель Барабаши-Бианкони является развитием модели предпочтительного присоединения Барабаши-Альберт; в новой модели акцент делается на изучение роста сети [1,2]. Несмотря на неравновесный и необратимый характер преобразований сетевых структур, эволюционирующие сети могут быть формально отображены в равновесный бозе-газ, при этом узлы сети будут соответствовать уровням энергии частиц, а связь между узлами – парой частиц на соответствующих уровнях. В таком случае появление в сети нового узла (исключение узла из сети) описывается появлением (исчезновением) уровня энергии, а создание (разрыв) связей описывается рождением (уничтожением) частиц на соответствующих уровнях энергии. Таким образом, такие характеристики конкурентных систем как «победитель забирает все», «стремительное обогащение» (*fit-get-rich, FGR*) и др. могут быть вполне описаны в рамках термодинамических законов.

Рассмотрим сеть, которая растет за счет добавления новых узлов, т.е. таких процессов, как создание новых веб-страниц, появление новых компаний или публикации новых документов. Рост сети начинается с некоторого (относительно небольшого) числа узлов, m_0 . В каждый последующий момент времени в сеть добавляется новый узел, а также *m* связей, соединяющих его с уже существующими узлами сети. Скорость, с которой узлы приобретают связи, может широко варьироваться, что подтверждается эмпирическими данными исследований в Интернете. Чтобы учесть способность узлов конкурировать за ссылки, определим для каждого узла параметр полезности (fitness) η , выбранный из распределения $p(\eta)$.

Принцип предпочтительного присоединения означает, что вероятность того, что новый узел соединяет одну из m своих связей с узлом i, уже присутствующим в сети, зависит от количества ссылок k_i и от коэффициента полезности η_i узла i, так, что

$$\Pi_i = \frac{\eta_i k_i}{\sum_i \eta_i k_i}.$$
(3.8)

Выражение (3.8) отражает тот факт, что новые узлы связываются преимущественно с узлами с более высоким k (т. е. подключаются к более «видимым» для агентов сети веб-сайтам, цитируют наиболее цитируемые статьи и пр.) и с более высокой полезностью η_i , определяющей наилучший (полезный для пользователя) контент, статьи с более сильными результатами и пр. Таким образом, коэффициент полезности η_i и число узлов k_i совместно определяют полезность и эволюцию узла.

Присвоим каждому узлу энергию ε_i , определяемую как

$$\varepsilon_i = -\frac{1}{\beta} \ln \eta_i , \qquad (3.9)$$

где $\beta = 1/T$ – безразмерный параметр имеющий смысл обратной температуры *T* (постоянную Больцмана здесь имеет смысл выбрать как $k_B = 1$). Тогда выражение (3.8) можно переписать в виде, которое совпадает по виду с распределением Больцмана для идеального бозе-газа, ср. с (1.17).

$$\Pi_i = \frac{k_i e^{-\beta \varepsilon_i}}{\sum_l k_l e^{-\beta \varepsilon_l}}.$$
(3.10)

На рис. 3.11(а) изображен фрагмент случайной сети и ее отображение на бозе-газ. Связь между двумя произвольными узлами сети *i* и *j*, обладающими коэффициентами полезности η_i и η_j , соответствует двум невзаимодействующим частицам на энергетических уровнях ε_i и ε_j .

В частности, на рис. 3.11(а) для наглядности показана сеть из пяти узлов (сплошные кружки и линии). Каждый узел характеризуется параметром полезности η_i , выбранным из распределения $p(\eta)$. Уравнение (3.9) задает энергию ε_i для каждого значения η_i , создавая систему (случайных) дискретных энергетических уровней (справа). Линия, связывающая узлы *i* и *j* соответствует частицам на уровнях с энергиями ε_i и ε_j , соответственно (частицы показаны красными точками). Можно видеть, что, хотя связанности узлов такой сети неодинаковы, узлы тем не менее различаются слабо. Новый узел в сети случайным образом создает две связи с уже существующими узлами, отдавая предпочтение лишь более связанным узлам, практически игнорируя их полезность.

Согласно (3.10) такое поведение сети может быть обусловлено либо одинаковой энергией (полезностью) узлов, $\varepsilon_i \equiv \varepsilon = const$, либо высокой температурой системы и, следовательно, $\beta \to 0$. В данном случае обратную температуру сети β можно интерпретировать как осведомленность нового узла о полезности существующих узлов. Например, в случае сети Интернет обратная температура может быть связана с эффективностью поисковой системы. Другой пример – влияние рекламы на выбор покупателя. Если бы покупатель точно знал свойства товаров, которые он собирается покупать, его выбор был бы детерминирован. Однако, поскольку в рекламе производитель часто выставляет вперед достоинства товара, пряча его недостатки, доступ потребителя к этой информации ограничивается, и его выбор становится более случайным. Подробнее о роли температуры в формировании различных сетевых структур см. следующий параграф.

При росте сети (на очередном временном шаге) добавляется новый узел (на рис. 3.11(а) это пунктирный (зеленый) круг с η_6), который соединяется с другими узлами m = 2 (пунктирными (зелеными) линиями), выбранными случайным образом. В модели газа это приводит к добавлению нового энергетического уровня (ε_6 , пунктирная (зеленая) линия), заполненного m=2 частицами, и рождению m = 2 других частиц на энергетических уровнях, к которым присоединяется узел с η_6 (ε_2 и ε_5); на рис. рис. 3.11 эти новые частицы изображены зеленым цветом для наглядности. Количество уровней энергии и частиц линейно возрастает со временем, как *t* и 2*mt*, соответственно.

Сети на рисунках 3.11(б) и 3.11(в) более упорядочены по сравнению со случайной сетью. В том случае, если полезность узлов различна, и температура сети достаточно мала, полезность узлов начинает играть большую роль в выборе новым узлом цели для присоединения. Сеть на рис. 3.11(б) демонстрирует

эффект «стремительного обогащения» или FGR-фазу (от англ. «Fit-get-Rich»). На рисунке можно видеть, что значительную долю связей получили несколько сильно связанных хабов, т.е. данная сеть является безмасштабной. Предельный случай FGR-фазы изображен на рис.3.11(в). В данном случае имеется лишь один хаб, обладающий максимальной полезностью и аккумулировавший в себе большинство связей.



Рисунок 3.11 Схематическая иллюстрация отображения сети на модель идеального газа для а) – участка случайной сети, (б) – фазы сети «стремительное обогащение» (fit-get-rich, FGR), и (в) – фазы БЭК. На диаграммах справа показаны уровни энергии ε_i , в которые отображаются связи узлов, остальные детали см. в тексте.

Изображение такой сети в виде бозе-газа демонстрирует заполнение нижнего уровня энергии макроскопически большим числом частиц, т.е. Бозеконденсат. Стоит отметить, однако, что в отличие от реальных бозе-газов, в сети маловероятна полная Бозе-конденсация. Если это условие не оговорено отдельно, наиболее полезный узел с большой вероятностью не будет являться и наиболее старым узлом, а значит, некоторая часть связей все же достанется менее пригодным, но более старым узлам.

3.5 Фазовые переходы в сетях

Рассмотрим различные фазы, предсказываемые моделью Бианкони-Барабаши, и переходы между ними.

Каждый узел (уровень энергии) эволюционирующей сети, добавленный к системе в момент времени t_i с энергией ε_i характеризуется числом заполнения k_i (ε_i , t, t_i), обозначающим число соединений (число частиц), которые узел (энергетический уровень) имеет в момент времени t. Скорость, с которой уровень ε_i приобретает новые частицы есть

$$\frac{\partial k_i(\varepsilon_i, t, t_i)}{\partial t} = m \frac{e^{-\beta \varepsilon_i} k_i(\varepsilon_i, t, t_i)}{Z_t} , \qquad (3.11)$$

где $Z_t = \sum_{j=1}^t e^{-\beta \varepsilon_j} k_j(\varepsilon_j, t, t_j)$ – статистическая сумма, ср. с (1.25). Полагаем, что каждый узел увеличивает свою связность, следуя степенному закону

$$k_i(\varepsilon_i, t, t_i) = m \left(\frac{t}{t_i}\right)^{f(\varepsilon_i)}, \qquad (3.12)$$

где $f(\varepsilon_i)$ – зависимый от энергии показатель.

Так же как η выбирается случайным образом из распределения $p(\eta)$, можно определить распределение уровней энергии (3.9):

$$g(\varepsilon) = \beta p(e^{-\beta \varepsilon}) e^{-\beta \varepsilon}.$$
(3.13)

Теперь мы можем определить Z_t усреднением по $g(\varepsilon)$, т.е.

$$\langle Z_t \rangle = \int \int_{-1}^{t} g(\varepsilon) e^{-\beta \varepsilon_i} k(\varepsilon, t, t_0) dt_0 d\varepsilon \approx m z^{-1} t,$$
 (3.14)

где $\frac{1}{z} = \int \frac{g(\varepsilon)e^{-\beta\varepsilon}}{1-f(\varepsilon)} d\varepsilon$ – параметр, связанный с химическим потенциалом μ как

 $z = e^{\beta \mu}$. Это позволяет переписать (3.13), (3.14) в виде:

$$e^{-\beta\mu} = \lim_{t \to \infty} \frac{\langle Z_t \rangle}{mt}.$$
(3.15)

Используя (3.12), можно решить уравнение (3.11), получив для генеративного показателя выражение

$$f(\varepsilon) = e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}.$$
(3.16)

Объединив выражение для z с (3.15), получаем уравнение

$$I(\beta,\mu) = \int d\varepsilon g(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} = 1.$$
(3.17)

Действительно, для идеального газа в единичном объеме $\int d\varepsilon g(\varepsilon)n(\varepsilon) = 1$, где $n(\varepsilon) -$ уже известное число заполнения уровня с энергией ε . Вместе с тем, из вида (3.16) следует, что числа заполнения в нашей модели подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, ср. с (1.30)

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}.$$
(3.18)

Таким образом, необратимость и «инертность» сети в термодинамическом пределе $t \to \infty$ определяются стационарностью асимптотического распределения (3.18). Решения (3.11), (3.12) и (3.14) существуют только тогда, когда существует μ , удовлетворяющий уравнению (3.17). Интеграл $I(\beta, \mu)$, определенный в (3.17), достигает максимума при $\mu = 0$, поэтому при $I(\beta, 0) < 1$ (для заданных β и $g(\varepsilon)$) уравнение (3.17) решения не имеет. Отсутствие такого решения означает конденсацию Бозе-Эйнштейна, что указывает на то, что конечная доля частиц $n_0(\beta)$ конденсируется на самом низком энергетическом уровне. Действительно, из-за закона сохранения массы в момент времени *t* мы имеем *t* уровней энергии, заполненных 2*mt* частицами

$$2mt = \sum_{t_0=1}^{t} k(\varepsilon_{t_0}, t, t_0) = mt + mtI(\beta, \mu).$$
(3.19)

В случае $I(\beta, 0) < 1$, выражение (3.19) должно быть изменено на $2mt = mt + mtI(\beta, \mu) + n_0(\beta),$ (3.20)

где $\frac{n_0(\beta)}{mt} = 1 - I(\beta, 0).$

Степень заполнения самого низкого энергетического уровня соответствует количеству узлов с наибольшим коэффициентом полезности η . Таким образом, появление ненулевого значения $n_0(\beta)$, что соответствует появлению БЭК в квантовых газах, для сетей представляет собой феномен «победитель забирает все», когда наиболее полезный узел приобретает конечную долю узлов, независимо от размера сети.

Подведем краткий итог вышесказанному. Система, определенная выше, обладает рядом свойств, которые существенно отличают ее от равновесного бозе-газа.

Во-первых, в квантовом газе частицы могут перескакивать между уровнями, приходя к равновесному состоянию. В описанной выше модели газ частиц «инертен», т.е. перескоки невозможны.

Во-вторых, количество присоединяемых узлов (частиц) растет линейно во времени, в отличие от фиксированного размера квантовой системы.

Однако, несмотря на эти различия в термодинамическом пределе (при $t \to \infty$) модель, описываемая (3.17), переходит в модель конденсации идеального равновесного бозе-газа.

Модель Бианкони-Барабаши предсказывает существование трех различных фаз, характеризующих свойства эволюционирующих случайных сетей.

Фаза безмасштабной сети. Эта фаза характеризуется одинаковым для всех узлов параметром полезности, т. е. $p(\eta) = \delta(\eta - 1)$, или, тоже самое для частиц газа $g(\varepsilon) = \delta(\varepsilon)$, см. рис. 3.8. Согласно (3.12) все узлы увеличивают свою связность пропорционально \sqrt{t} ($f(\varepsilon) = 1/2$), т.е. самый старый узел является самым связанным. Однако, самый старый и наиболее «богатый» узел не является абсолютным победителем, как его доля связей так $k_{max}(t)/(mt)$ в термодинамическом пределе стремится к нулю по закону $1/\sqrt{t}$. Таким образом, существует непрерывная иерархия больших узлов, так что распределение степеней (3.7) имеет вид степенной функции $P(k) \sim k^{-3}$, см. рис 3.7. Другие локальные процессы с узлами могут изменять масштабные показатели сложной сети, однако это не влияет на термодинамические свойства данной фазы.

Фаза «стремительное обогащение» (fit-get-rich, FGR-фаза). Эта фаза возникает в сетях, в которых узлы имеют разный коэффициент полезности, и уравнение (3.17) имеет решение в виде $I(\beta, \mu) = 1$. С «физической» точки зрения это соответствует около-конденсатной фазе, т.е. фазе вблизи критического значения температуры T_c , после которой возможен фазовый переход к конденсации. Уравнение (3.12) указывает на то, что каждый узел увеличивает свою связность во времени, но генеративный показатель больше для узлов с более высоким коэффициентом полезности. Это позволяет узлам присоединяться к системе в более позднее время и превосходить менее подходящие, при этом, однако, старые узлы приобретают связи с более высокими скоростями. Таким образом, данная фаза описывает феномен «стремительное обогащение». Как и в случае безмасштабной фазы, доля связей самого полезного узла в термодинамическом пределе уменьшается до нуля. Действительно, поскольку $f(\varepsilon) < 1$, относительная связность самого подходящего узла уменьшается как

$$\frac{k(\varepsilon_{\min},t)}{mt} \sim t^{f(\varepsilon_{\min})-1} \tag{3.21}$$

Это соревнование снова приводит к появлению иерархии нескольких крупных хабов, сопровождаемых многими менее связанными узлами, $P(k) \sim k^{-\gamma}$, где γ можно вычислить аналитически, если известно распределение $p(\eta)$.

На рис. 3.11(б) схематически показана сложная сеть в FGR-фазе. Для данной фазы имеем непрерывное распределение связности; узлы, имеющие высокую связность, объединяют многочисленные малосвязанные узлы вместе. На энергетической диаграмме это соответствует росту заполнения основного состояния энергии.

Фаза БЭК. Данная фаза возникает, когда уравнение (3.17) не имеет решений. Это означает, что узел с наибольшим коэффициентом полезности становится явным победителем, а конечная доля частиц $n_0(\beta)$ рождается на соответствующем низшем уровне энергии (низшее макроскопически заполненное состояние на рис.3.11.(в)). Таким образом, фаза БЭК демонстрирует реальный феномен победителя, в котором самый подходящий узел является не только самым большим, но, несмотря на непрерывное появление новых узлов, конкурирующих за ссылки, он также всегда приобретает конечную долю узлов [2].

Чтобы продемонстрировать существование фазового перехода в системе предположим следующее распределение энергии

$$g(\varepsilon) = Ce^{\theta}, \qquad (3.22)$$

где θ – свободный параметр, а диапазон энергии находится в интервале $\varepsilon \in (0:\varepsilon_{\max}); C = \frac{(\theta+1)}{\varepsilon_{\max}^{\theta+1}}$ – нормировочный множитель, который находится из

условия $\int d\varepsilon g(\varepsilon) = 1$. В результате, подставляя (3.22) в (3.17), получаем условие для БЭК

$$\frac{\theta+1}{\left(\beta\varepsilon_{\max}\right)^{\theta+1}}\int_{\beta\varepsilon_{\min}(t)}^{\beta\varepsilon_{\max}}dx\frac{x^{\theta}}{e^{x}-1}<1,$$
(3.23)

где $\varepsilon_{\min}(t)$ соответствует наименьшему энергетическому уровню (наиболее полезному узлу), присутствующему в системе в момент времени *t*. Расширяя пределы интегрирования от нуля до бесконечности, находим нижнюю оценку для критической температуры $T_c = \frac{1}{\beta_c}$.

$$T_{\rm C} > \varepsilon_{\rm max} \left[\zeta \left(\theta + 1 \right) \Gamma \left(\theta + 2 \right) \right]^{-\frac{1}{(\theta+1)}}.$$
(3.24)

На рис. 3.12 представлены результаты численного моделирования фазового перехода в сети. Температура фазового перехода между фазами FGR и ВЕ (БЭК) соответствует точке, в которой химический потенциал μ меняет знак, что отчетливо видно из рис. 3.12(а). На рис. 3.11(б) представлены зависимости функций распределения «заселенности» самого связанного узла от эффективной температуры. Видно, что отношение $k_{max}(t)/mt$ не зависит от времени в фазе БЭК, указывая на то, что наибольший узел поддерживает конечную долю от общего числа узлов, даже когда сеть продолжает расширяться, что подтверждает эффект конденсации.



Рис. 3.12 Численное моделирование фазового перехода в сложной сети в модели Бианкони-Барабаши – зависимости от температуры Т для (a) – величины химического потенциала и (б) – доли k_{max}/(mt) общего количества связей, соединенных с наиболее связанным узлом – «победителем». m = 2 и θ = 1, ср. с [2]

При $T > T_{\rm C}$, наиболее связанный узел постепенно теряет свою долю связей; $k_{max}(t)/mt$ уменьшается со временем. Численно определенная фазовая диаграмма подтверждает, что анализ (3.24) дает нижнюю границу для FGR. На практике T играет роль простого управляющего параметра в модели, позволяя настраивать его на переход от FGR к фазе БЭК. Наличие фазы FGR в численно изученной модели основывается на нашем технически более простом выборе определения $g(\varepsilon)$, не зависящим от T. Однако при изменении θ , фазовый переход возникает также при фиксированном T, поэтому для такого перехода T не требуется.

Наконец, при $T < T_{\rm C}$ все новые частицы займут нижний энергетический уровень, соответственно все новые узлы присоединятся к наиболее полезному из существующих узлов. Как уже было сказано, ситуация чистого БЭКа (один хаб, содержащий все связи) очень маловероятна, если только правила сети не предписывают отдельно наиболее полезному узлу быть еще к тому же и самым старым. Таким образом, даже в состоянии БЭК небольшая часть связей достается менее полезным, но более старым узлам. Такой сети соответствует безмасштабный граф, связанность которого описывается степенным законом, т.е. доля вершин такого графа со степенью (числом связей) k пропорциональна $k^{-\gamma}$, где γ – некоторая постоянная.

Практическое применение. Генеративные модели сложных (в т.ч. комплексных) сетевых структур находят применение в первую очередь в построении алгоритмов генерации сетей и графов. Так, модель Бианкони-Барабаши, описанная выше, позволила разработать алгоритм генерации растущей сети симплициальных комплексов (треугольников) [18].



Рисунок 3.13 – Исходное состояние и первые три шага эволюции растущей сети симплициальных комплексов (треугольников). Синим цветом выделен узел, добавленный в сеть на текущем шаге; образующиеся при этом связи обозначены синими пунктирными линиями.



Рисунок 3.14 – Визуализация растущей сети симплициальных комплексов (треугольников), подчиняющейся статистике Бозе-Эйнштейна в зависимости от параметра β = 1/T при N = 1000 [18].

В начальный момент времени сеть состоит из трех узлов, соединенных тремя связями, образующих треугольник, см. рис. 3.13. В каждый последующий момент времени в сеть добавляется один новый узел, создающий по одной связи с двумя уже существующими узлами, формируя новый треугольник. В том случае, если связанность узлов ничем не ограничена, что соответствует большинству реальных сетей, в том числе сети Интернет, данную сеть можно описать статистикой Бозе-Эйнштейна и наблюдать в ней фазовые переходы, описанные выше.

На рис.3.14 изображены результаты работы алгоритма Бианкони-Барабаши на тысячном шаге при различных температурах сети. Видно, что при больших T сеть представляет собой «тесный мир», однако с уменьшением Tпроисходит фазовый переход к БЭК. Эмпирически определенное критическое значение температуры в данном случае есть $T_c = 1/0.06$.

3.6 Задания для практических занятий

Задание 1. Для заданного графа, см. рис.3.15 найдите

а) матрицу смежности вершин,

б) матрицу инцидентности,

в) степенную последовательность,

г) среднюю связанность,

д) плоское изображение, если граф плоский (либо докажите, что граф не плоский).

Решение. Матрицей смежности вершин графа, состоящего из *n* вершин называют такую матрицу $n \times n$, $A = (a_{ij})$ у которой каждый элемент подчиняется правилу (3.3).



Рисунок 3.15 – изображения графов для задания 1

Матрицей инцидентности $B = (b_{ij})$ неориентированного графа называется прямоугольная матрица ($n \times m$), где n – число вершин, m – число ребер, и элементы подчиняются правилу (3.5). Набор чисел, являющихся степенями вершин графа, называют его степенным множеством. Степенная последовательность – вектор, составленный из степеней вершин графа, расположенных в порядке не возрастания. Средняя степень вершин графа определяется по формуле (3.2). Граф называется *плоским*, если он может быть изображен на плоскости так, что все пересечения ребер являются его вершинами.

Разберем решение задания на примере графа 1.1. Матрицей смежности такого графа будет соответствовать матрица *A*, а матрицей инцидентности графа *B*:

	/0	0	0	0	0	0	1	0\		/1	0	0	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	1	0	1	<i>B</i> =	0	0	0	0	0	0	0	1	1
	0	0	0	1	0	1	1	1		0	1	1	0	0	0	0	0	0
<u> </u>	0	0	1	0	1	1	0	1		0	0	1	1	0	1	1	0	0
A —	0	0	0	1	0	1	0	0		0	0	0	1	1	0	0	0	0
	0	1	0	1	1	0	0	0		0	0	0	0	1	1	0	0	1
	1	0	1	0	0	0	0	0		1	1	0	0	0	0	0	0	0 /
	/0	1	0	1	0	0	0	0/		/0	0	0	0	0	0	1	1	0/

Степенная последовательность графа: (4,3,2,2,2,2,2,1). Средняя степень $\langle k \rangle = \frac{18}{8} = 2,25$. Плоское изображение графа $F(\mathbf{q},\mathbf{p}) - \mathrm{см.}$ рис. 3.16.



Рисунок 3.16 – плоское изображение графа 1.1.

Задание 2. Постройте реализацию данного степенного множества с минимально возможным числом вершин:

a)(4,4,3,3,3,3,2); б)(4,3,3,3,3,3,3); в)(3,3,3,3,3,3,3,3); г)(3,3,3,3,2,2,2,2); д)(4,3,3,3,3,3,2); e)(5,3,3,3,3,2,2,1);

Решение. Вариант изображения графа, задаваемого вектором а) (4,4,3,3,3,3,2) представлен на рис. 3.17.



Рисунок 3.17 – изображение графа (а).

3.7 Вопросы и упражнения для самостоятельной работы

1) Объясните формулу (3.19). Почему при *I*(β, 0) < 1 формула (3.19) должна быть заменена на (3.20)?

2) Возможен ли фазовый переход в сети с полиномиальным распределением энергии, $g(\varepsilon) = C\theta^2$? Если да, найдите условие БЭК. Если нет, докажите.

3.8 Литература

1. Albert, R. Statistical mechanics of complex networks / R. Albert, A.L. Barabási // Reviews of modern physics. – 2002. – T. 74. – №. 1. – c. 47

2. Bianconi, G. Bose-Einstein condensation in complex networks / G. Bianconi, A.L. Barabási // Physical review letters. – 2001. – T. 86. – №. 24. – c. 5632

3. Бояринцева, Т.И. Теория графов: метод. указания [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / Т.И. Бояринцева, А.А. Мастихина. — Электрон. дан. — Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. — 37 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/58426. — Загл. с экрана

4. Райгородский, А.М. Модели случайных графов / А.М. Райгородский. – М.: МЦНМО, 2011. – 136 с. – ISBN 978-5-94057-840-6

5. Newman, M. E. J. The structure and function of complex networks / M. E. J. Newman // SIAM review. – 2003. – T. 45. – №. 2. – c. 167-256

6. Durrett R. Random graph dynamics. – Cambridge : Cambridge university press, $2007. - N_{\odot}$. 7. – 226 c.

7. Broido A. D., Clauset A. Scale-free networks are rare //arXiv preprint arXiv:1801.03400. – 2018

8. Bollobás, B. The diameter of a scale-free random graph / B. Bollobás, O. Riordan // Combinatorica. – 2004. – T. 24. – №. 1. – c. 5-34

9. Льюис, Р.Д. Игры и решения: Введение и критический обзор / Р.Д. Льюис, Х. Райфа. – М.: Издательство иностранной лит-ры, 1961. – 424 с.

10. Fortunato, S Community detection in networks: A user guide / S. Fortunato, D. Hric // Physics Reports. -2016. -T. 659. -c. 1-44

11. Adamic, L.A. The political blogosphere and the 2004 US election: divided they blog / L.A. Adamic, N. Glance // Proceedings of the 3rd international workshop on Link discovery. - ACM, 2005. - c. 36-43

12. Khrennikov, A.Y. Ubiquitous quantum structure / A.Y. Khrennikov. – Springer, 2014. – 215 c.

13. Holyst, J.A. Cyberemotions: Collective Emotions in Cyberspace / J.A. Holyst. – Springer, 2016. – 317 c.

14. Khrennikov, A.Yu. 'Social Laser': action amplification by stimulated emission of social energy. / A.Yu. Khrennikov // Phil. Trans. R. Soc. A. – 2016. – T. 374. – c. 20150094

15. Granovetter, M. Threshold Models of Collective Behavior / M. Granovetter // American Journal of Sociology. – 1978. – T. 83., №. 6. – c. 1420-1443

16. Андреев, А.Ф. Сверхтекучесть, сверхпроводимость и магнетизм в мезоскопике / А.Ф. Андреев // Успехи физических наук. – 1998. – Т. 168. – №. 6. – с. 655-664

17. Albert, R. Error and attack tolerance of complex networks / R. Albert, H. Jeong, A.L. Barabási // Nature. – 2000. – T. 406. – №. 6794. – c. 378

18. Bianconi, G. Complex quantum network geometries: Evolution and phase transitions / G. Bianconi, C. Rahmede, Z. Wu // Physical Review E. -2015. – T. 92. – No. 2. – c. 022815

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Миссия университета – открывать возможности для гармоничного развития конкурентоспособной личности и вдохновлять на решение глобальных задач.

ФАКУЛЬТЕТ ЛАЗЕРНОЙ ФОТОНИКИ И ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

Факультет лазерной фотоники и оптоэлектроники создан в 2018 г. и объединил в себе кафедры и подразделения, имеющие давние и богатые традиции Университета ИТМО в плане исследований сложных процессов, протекающих в микро- и наноструктурах, в том числе и под воздействием лазерного излучения. Исследование таких процессов бакалаврами, магистрантами и аспирантами факультета невозможно без понимания и умения правильно применять законы статистической физики и статистической механики, а также квантовой теории.

В настоящее время в мире активно развиваются экспериментальные исследования квантовых когерентных макроскопических эффектов, проявляющиеся в таких структурах в виде Бозе-Эйнштейновских конденсатов. Интенсивно развиваются также теоретические методы их исследований. С недавних пор такие методы стали применяться при изучении процессов, протекающих в сложных сетевых структурах, какими является сеть Интернет, различные социальные системы и сообщества. Отличительной особенностью предлагаемого Пособия является возможность взглянуть на данные проблемы с точки зрения единого междисциплинарного подхода, актуального также и для развития информационных технологий в Университете ИТМО. Это, в свою очередь, позволит применять формализм квантовой теории вероятности, квантовой теории измерений и теории открытых квантовых систем к изучению и моделированию различных систем за пределами естественных наук – например, в социологии, психологии, экономике и финансах. В частности, речь идет об исследованиях с применением методов квантовой и статистической физики для построения математических моделей, описывающих когнитивные и социальные явления, информационное взаимодействие человека и социума, разработку квантовых моделей для описания процессов принятия человеком решений, фазовых переходов в сложных системах в экономике и финансах, изучения возможностей создания новых интеллектуальных систем с квантовыми алгоритмами машинного обучения. Можно уже определенно сказать, что данные направления исследований учащимися Университета ИТМО станут полностью востребованными в XXI веке на рынке высоких технологий как в России, так и за рубежом.

Алоджанц Александр Павлович Баженов Андрей Юрьевич Царёв Дмитрий Владимирович

КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА СЛОЖНЫХ СЕТЕВЫХ СТРУКТУР Учебное пособие

Редакционно-издательский отдел университета ИТМО Зав. РИО Н.Ф. Гусарова Подписано к печати Заказ № Тираж Отпечатано в ...

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49