



ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА И УПРАВЛЕНИЕ

УДК 530.1+531.19

DOI: 10.25206/1813-8225-2018-159-118-122

**А. В. МЫШЛЯВЦЕВ
М. Д. МЫШЛЯВЦЕВА**Омский государственный
технический университет,
г. Омск

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ТРАНСФЕР МАТРИЦЫ РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА ЖЕСТКИХ ЧАСТИЦ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С ИСКЛЮЧЕНИЕМ ВПЛОТЬ ДО 3-го СОСЕДСТВА

В работе использован метод трансфер матрицы для изучения системы жестких частиц на треугольной решетке с исключением 1-го, 2-го и 3-го соседства. При построении трансфер матрицы была использована схема генерации колец, основанная на отборе допустимых состояний непосредственно в процессе их построения. Этот подход позволяет увеличить доступные размеры колец. Были построены изотермы модели для всех трех случаев. Для первого и второго были воспроизведены известные результаты. Для третьего случая было показано, что в системе наблюдается фазовый переход первого рода и размер элементарной ячейки упорядоченной фазы равняется семи.

Ключевые слова: фазовые переходы, метод трансфер-матрицы, треугольная решетка, решеточные модели с исключением соседства.

Работа была выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 17-71-20053).

Введение. Модели решеточного газа, в которых частицы являются жесткими объектами, взаимодействующими друг с другом только через исключение соседства при определенном взаимном расположении, относятся к числу простейших систем, демонстрирующих фазовые переходы.

Модели такого типа могут описывать замерзание жидкостей [1], решеточных животных [2], адсорбцию сложных молекул и другие родственные системы. Начиная с середины 50-х годов прошлого века активно изучаются двумерные модели с различной формой частиц: квадраты [3], шестиугольники [4], димеры с исключением ближайшего соседства [5–8], треугольники [9], прямоугольники [10]

и т.д. Было предпринято много усилий для получения решений на двумерных решетках и решетках более высоких размерностей. К сожалению, единственное (не считая аналогичных) точное решение было получено для модели жестких гексагонов [4]. Ввиду отсутствия точных решений для большинства интересных задач, мы вынуждены использовать различные приближенные подходы.

В данной работе мы сосредоточим свое внимание на модели решеточного газа на треугольной решетке с исключением соседства определенного уровня. В рамках этой модели (решеточный аналог модели жестких дисков) узлы решетки, принадлежащие к первым N координатным сферам (окружностям

для рассматриваемого случая 2D систем) не могут быть заняты другой частицей. Эта модель (простейшая форма частицы) используется, в частности, при описании адсорбции на поверхности твердых тел [11]. Как уже говорилось, решеточная модель с исключением ближайшего соседства до определенной координационной сферы является решеточной версией модели жестких сфер (модели жестких дисков для двумерного случая). Хорошо известно, что система жестких сфер при высокой плотности испытывает фазовый переход к кристаллической структуре. В пространстве двух измерений общепризнанный сценарий перехода от газа к кристаллу КТННУ (Костерлиц – Таулес – Гальперин – Нельсон – Янг) [12–14] предсказывает два непрерывных фазовых перехода. Вместе с тем даже для простейшей системы жестких дисков одного диаметра относительно рода этих переходов существуют различные точки зрения [15, 16]. В связи с этой проблемой представляют несомненный интерес модели с исключением ближайшего соседства при достаточно большом k .

На квадратной решетке описываемая модель изучена достаточно хорошо [17]. При $k=1$ (1-NN модель) существует один непрерывный фазовый переход, свойства которого хорошо изучены [17–19]. При $k=2$ (2-NN модель), так же как и при $k=1$, наблюдается единственный непрерывный фазовый переход [17, 20–22]. При $k=3$ (3-NN модель) род фазового перехода меняется и наблюдаемый фазовый переход оказывается переходом первого рода [17, 23]. При $k=5$ (5-NN модель) фазовый переход по-прежнему первого рода [17]. В недавней работе [24] было показано, что при $k=4$ (4-NN модель) в системе существуют два непрерывных фазовых перехода, а также изучены системы при $6 \leq k \leq 11$. Утверждается, что при $k=6,7,8,9$ существует единственный фазовый переход первого рода, при $k=10$ — два перехода: один непрерывный, а второй — первого рода. И, наконец, при $k=11$ — два перехода, свойства которых не были однозначно установлены.

Как это часто бывает, решетки, отличные от квадратной, изучены существенно хуже. Так, в частности, на треугольной решетке изучались модели при $k=1$ и $k=2$ (1-NN и 2-NN модели). При $k=1$ мы получаем хорошо известную модель жестких гексагонов, для которой было получено точно аналитическое решение [4]. Фазовый переход для этой модели непрерывный. Модель при $k=2$ изучалась в работе [25], где было показано, что в системе существует непрерывный фазовый переход и определены его параметры.

Целью нашей работы является определение рода фазового перехода при $k=3$ и сравнение полученного результата с аналогичным для квадратной решетки.

Модель и метод. В качестве численного метода мы будем использовать метод трансфер-матрицы [18, 26], некоторые детали которого будут описаны ниже.

Рассмотрим треугольную решетку $L \times \infty$ с периодическими граничными условиями вдоль конечного направления. Узел решетки может быть занят только одной частицей. Первые k ближайших соседних узлов не могут быть заняты другими частицами (k -NN модель). На рис. 1 показаны запрещенные места для $k=1,2,3$ соответственно. Для данного k все места, помеченные цифрами, меньшими или равными k , являются запрещенными. В целях дальнейшего использования метода трансфер-матрицы выберем удобные группы узлов исходной решетки, которые

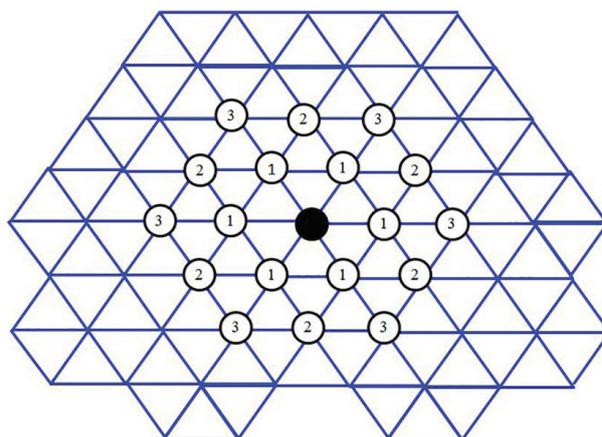


Рис. 1. Черным кружком показан центр жесткой частицы. Цифры 1, 2 и 3 показывают узлы первой, второй и третьей координационной сферы для жесткой частицы

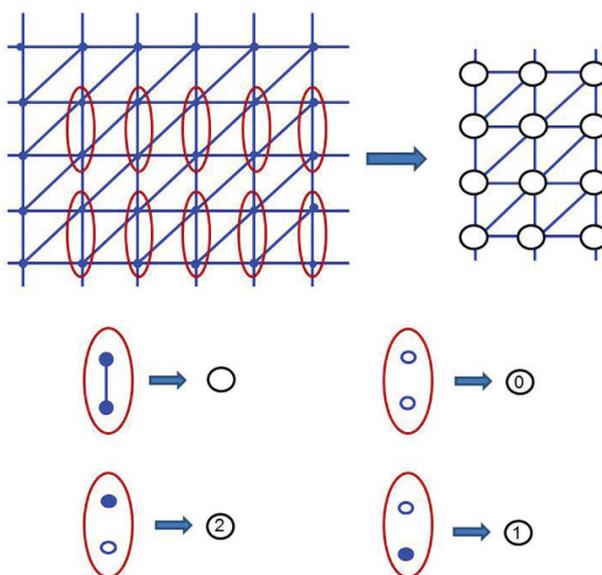


Рис. 2. Овалами выделена группа из двух узлов исходной решетки, которая выбирается в качестве узла новой решетки. Показано соответствие между состояниями выбранной пары узлов и нового узла, которые помечены цифрами 0, 1, 2

будем обозначать как узлы новой решетки. Для $k=1$ новый узел будет совпадать со старым. При $k=2$ и 3 в качестве нового узла удобно выбрать пару соседних узлов, расположенных вдоль «бесконечного» направления. Новые узлы, как показано на рис. 2, снова формируют треугольную решетку, однако теперь каждый узел может находиться в трех состояниях, которые также показаны на этом рисунке.

Трансфер-матрица модели решеточного газа всегда может быть записана в следующем виде [26]:

$$\mathbf{T} = \mathbf{DAD}, \quad (1)$$

где \mathbf{D} — диагональная матрица, ненулевые элементы которой определяются следующим равенством:

$$D_{ii} = \exp\left(\frac{\mu n(i)}{2RT}\right), \quad (2)$$

здесь $n(i)$ — число ненулевых элементов в i -м кольце; μ — химический потенциал; R — универсальная газовая постоянная; T — температура в градусах Кельвина.

Для рассматриваемого класса моделей матрица A является целочисленной матрицей, элементы которой равняются либо нулю, либо единице в зависимости от того, разрешена или нет пара колец (i, j) .

С учетом экспоненциального роста размерности трансфер-матрицы при увеличении числа узлов в кольце как ρ^L (ρ — число состояний узла), это обстоятельство обычно является лимитирующим фактором при использовании метода. Размерность используемой матрицы может быть уменьшена примерно в L раз, если учесть трансляционную инвариантность колец. Это достигается путем построения некоторой редуцированной матрицы R , размерность которой примерно в L раз меньше, чем исходной матрицы T , и ее наибольшее по модулю собственное значение совпадает с наибольшим по модулю собственным значением матрицы T [18, 26]. Структура матрицы R аналогична структуре матрицы T , и она может быть представлена в виде (1), где центральная матрица по-прежнему является целочисленной, однако ее элементы принимают значения от нуля до L , а не только нуль и единица.

При нахождении наибольшего по модулю собственного значения матрицы R достаточно эффективным оказывается метод простой итерации.

Остановимся кратко на способе генерации колец возможных состояний колец из L узлов с учетом пространственных запретов. По-видимому, наиболее экономный алгоритм, преимущества которого особенно явно проявляются при больших L и значительном числе запретов, заключается в следующем.

Пусть построено множество из L узлов со свободными границами (без замыкания в кольцо). Чтобы построить множество рядов из $L+1$ узла, необходимо присоединить дополнительный узел и отсеять в процессе построения недопустимые конфигурации. На втором шаге мы замыкаем полученные ряды в кольцо и снова элиминируем недопустимые конфигурации. Изложенный подход существенно экономит как время, так и требуемый объем оперативной памяти по сравнению с традиционным, который сводится к построению всех ρ^L колец с последующим отбором.

Описанный алгоритм позволяет получить линейные рекуррентные соотношения для числа допустимых рядов. Эти соотношения весьма полезны при предварительной оценке трудоемкости вычислений.

Для $k=1$ соответствующие выражения хорошо известны и имеют следующий вид:

$$\begin{cases} n_0(L+1) = n_0(L) + n_1(L) \\ n_1(L+1) = n_0(L) \end{cases}, \quad (3)$$

где $n_0(L)$ и $n_1(L)$ — число рядов длины L , оканчивающихся на 0 (узел пуст) или на 1 (узел занят), соответственно.

Система (3) легко может быть превращена в единственное уравнение для полного числа рядов длины L .

$$n(L+1) = n(L) + n(L-1), \quad (4)$$

где $n(L)$ — полное число рядов длины L .

Легко видеть, что рекуррентное уравнение (4) имеет решением последовательность Фибоначчи

с дополнительным условием $n(1)=2$, $n(2)=3$. При больших L числа Фибоначчи удовлетворяют известной асимптотике:

$$n(L) \sim \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^L \approx \frac{1}{\sqrt{5}} (1,618\dots)^L, \quad (5)$$

Из (5) следует, что используемый нами алгоритм генерации колец при больших L существенно превосходит стандартный, для которого число генерированных колец равняется 2^L .

Запишем рекуррентные соотношения для случаев $k=2$ и $k=3$.

(а) $k=2$. Число состояний узла $p=3$, соответственно система рекуррентных соотношений имеет следующий вид:

$$\begin{cases} n_{00}(L+1) = n_{00}(L) + n_{10}(L) + n_{20}(L) \\ n_{01}(L+1) = n_{00}(L) + n_{10}(L) + n_{20}(L) \\ n_{02}(L+1) = n_{00}(L) + n_{20}(L) \\ n_{10}(L+1) = n_{01}(L) \\ n_{20}(L+1) = n_{02}(L) \end{cases}, \quad (6)$$

где $n_{ij}(L)$ число рядов, у которых последние два узла находятся в состоянии i и j соответственно.

Смысл индексов i, j показан на рис. 2.

(б) $k=3$. Число состояний узла $p=3$. Система рекуррентных соотношений имеет следующий вид:

$$\begin{cases} n_{00}(L+1) = n_{00}(L) + n_{10}(L) + n_{20}(L) \\ n_{01}(L+1) = n_{00}(L) + n_{10}(L) + n_{20}(L) \\ n_{02}(L+1) = n_{00}(L) \\ n_{10}(L+1) = n_{01}(L) \\ n_{20}(L+1) = n_{02}(L) \end{cases}. \quad (7)$$

Эта система может быть заменена следующим рекуррентным уравнением

$$n_{00}(L+1) = n_{00}(L) + 2n_{00}(L-2) + n_{00}(L-4). \quad (8)$$

Эффективность используемого алгоритма генерации колец для исследуемых моделей снова существенно выше, чем традиционного.

Для $k=3$ получаем

$$n(L) \sim (1,75487)^L. \quad (9)$$

Очевидно, что $n(L)$ при достаточно больших L существенно меньше, чем 3^L .

При построении изотерм всех трех моделей использовалось стандартное соотношение метода трансфер-матрицы [18, 26], принимающее в данном случае следующий вид:

$$\Omega = -\frac{RT \ln(\lambda_{max})}{[L(p-1)]}, \quad \rho = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_T, \quad (10)$$

где λ_{max} — наибольшее по модулю собственное значение трансфер-матрицы; Ω — большой термодинамический потенциал, приходящийся на один узел решетки; ρ — среднее число частиц в одной ячейке.

Результаты и обсуждение. Хорошо известно, что для определения положения точки фазового перехода и его свойств при использовании приближен-

ных подходов, таких как метод трансфер-матрицы или метод Монте Карло, критическим параметром является размер системы, поэтому необходимо использовать максимально возможные размеры. Это, естественно, определяется вычислительными мощностями, доступными исследователю.

Число узлов в кольце L должно быть кратным одному из размеров элементарной ячейки упорядоченной фазы, формирующейся в исследуемой модели.

Соответственно, при $k=1$ мы имеем хорошо известный результат. $L=3m$, где m — положительное целое число.

Нами были построены изотермы при $L=6, \dots, 24$, которые воспроизводят известные результаты. Изотермы при $L=12, 18$ и 24 показаны на рис. 3. Хорошо видна точка фазового перехода второго рода, определяемая точкой перегиба изотермы. При $k=1$ (модель жестких гексагонов) известно точное значение критической активности [4]

$$z_c = e^{\frac{\mu_c}{RT}} \approx 11,09017... \quad (11)$$

Из рис. 3 легко видеть, что точка перегиба изотермы с ростом L смещается по направлению к точному значению. Использование феноменологического конечно-размерного скэйлинга позволяет определить положение точки фазового перехода с достаточно высокой степенью точности, однако это не является целью данной работы.

При $k=2$ необходимая кратность величины L оказывается равной 2 ($L=2m$). Нами были построены изотермы при $L=6, 8, \dots, 18$. На рис. 4 показаны изотермы при $L=8, 12, 18$. Здесь также хорошо видна точка фазового перехода второго рода при $\rho \approx 0,092$, что хорошо коррелирует с известным результатом [25] (с учетом выбранной нормировки). Отметим, что по сравнению со случаем $k=1$ положение точки перегиба слабо зависит от L .

Как показывает анализ полученных результатов, при $k=3$ размер элементарной ячейки равеняется 7. Соответственно, мы должны выбирать значение $L=7m$. На рис. 5 показаны изотермы при $L=14, 18, 20, 21$. Хорошо видно, что с высокой достоверностью в данном случае происходит фазовый переход первого рода.

Таким образом, мы показали, что, так же как и в случае квадратной решетки, изменяется тип фазового перехода. Заметим, что это происходит в обоих случаях при переходе от $k=2$ к $k=3$. Очевидно, что необходимо продолжить исследования в этом направлении, увеличивая число исключенных соседей и ширину полосы, используемой в методе трансфер-матрицы.

Благодарности

Авторы благодарят сотрудников кафедры «Химическая технология и биотехнология» Акименко Сергея Сергеевича, Горбунова Виталия Алексеевича, Стишенко Павла Викторовича за полезные советы и плодотворное обсуждение.

Библиографический список

1. Alder B. J., Wainwright T. E. Phase transition in elastic disks // *Physical Review*. 1962. Vol. 127. P. 359–361. DOI: 10.1103/PhysRev.127.359.

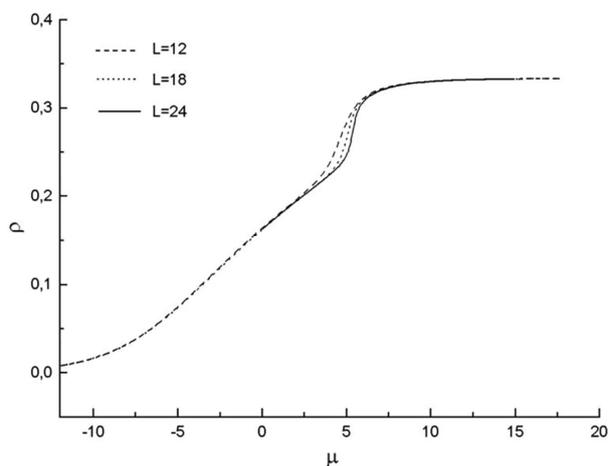


Рис. 3. Изотермы при $k=1$ (1-NN модель)

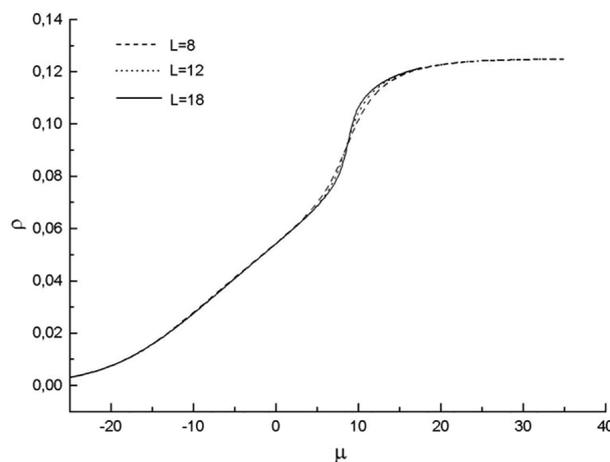


Рис. 4. Изотермы при $k=2$ (2-NN модель)

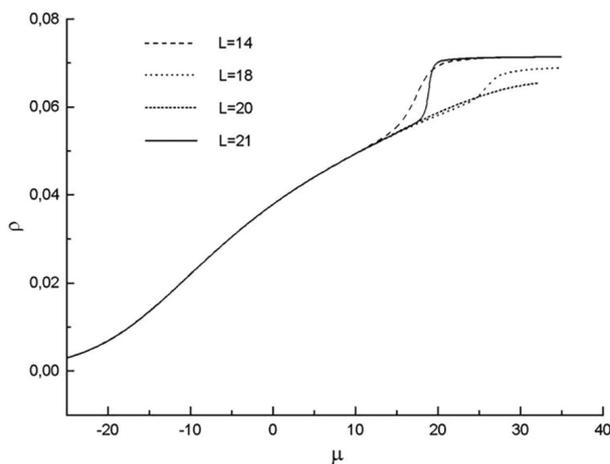


Рис. 5. Изотермы при $k=3$ (3-NN модель)

2. Brydges D. S., Imbrie J. Z. Dimensional reduction formulas for branched polymer correlation functions // *Journal of Statistical Physics*. 2003. Vol. 110. P. 503–518.

3. Ramola K., Dhar D. High-activity perturbation expansion for the hard square lattice gas // *Physical Review E*. 2012. Vol. 86 (3). 031135. DOI: 10.1103/PhysRevE.86.031135.

4. Бэкстер П. Точно решаемые модели в статистической механике: моногр. М.: Мир, 1985. 488 с.

5. Dickman R. Discontinuous phase transition in a dimer lattice gas // *The Journal of Chemical Physics*. 2012. Vol. 136. 174105. DOI: 10.1063/1.4918908.
6. Fefelov V. F., Gorbunov V. A., Myshlyavtsev A. V., Myshlyavtseva M. D. Model of homonuclear dimer adsorption in term of two possible molecule orientations with respect to surface: square lattice // *Physical Review E*. 2010. Vol. 82. 041602. DOI: 10.1103/PhysRevE.82.041602.
7. Akimenko S. S., Gorbunov V. A., Fefelov V. F., Myshlyavtsev A. V., Myshlyavtseva M. D. Devil's staircase behavior of a dimer adsorption model // *Adsorption*. 2013. Vol. 19. P. 495–499.
8. Akimenko S. S., Fefelov V. F., Myshlyavtsev A. V., Stishenko P. V. Remnants of the devil's staircase of phase transitions in the model of dimer adsorption at nonzero temperature // *Physical Review B*. 2018. Vol. 97. 085408. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.085408.
9. Verberkmoes A., Nienhuis B. Triangular trimmers on the triangular lattice: an exact solution // *Physical Review Letters*. 1999. Vol. 83. P. 3986–3989. DOI: 10.1103/PhysRevLett.83.3986.
10. Kundu J., Rajesh R. Phase transitions in a system of hard rectangles on the square lattice // *arXiv: 1401.5590v3[cond-mat.stat-mech]* 16 May 2014.
11. Fefelov V. F., Gorbunov V. A., Myshlyavtsev A. V., Myshlyavtseva M. D. The simplest self-assembled monolayer model with different orientations of complex organic molecules. Monte Carlo and transfer-matrix techniques // *Chemical Engineering Journal*. 2009. Vol. 154. P. 107–114.
12. Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1973. Vol. 6. P. 1181–1203.
13. Nelson D. R., Halperin B. I. Dislocation-mediated melting in two dimensions // *Physical Review B*. 1979. Vol. 19. P. 2457–2484. DOI: 10.1103/PhysRevB.19.2457.
14. Young A. P. Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions // *Physical Review B*. 1979. Vol. 19. P. 1855–1866. DOI: 10.1103/PhysRevB.19.1855.
15. Bernard E. P., Krauth W. Two-step melting in two dimensions: first-order liquid-hexatic transition // *Physical Review Letters*. 2011. Vol. 107. 155704. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.155704.
16. Wierchem K., Manousakis E. Simulation of melting of two-dimensional Lennard-Jones solids // *Physical Review B*. 2011. Vol. 83. 214108. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.214108.
17. Fernandes H. C. M., Arenzon J. J., Levin Y. Monte Carlo simulations of two-dimensional hard-core lattice gases // *Journal of Chemical Physics*. 2007. Vol. 126. 114508. DOI: 10.1063/1.2539141.
18. Runnels L. K., Combs L. L. Exact finite method of lattice statistics I. Square and triangular lattice gases of hard molecules // *Journal of Chemical Physics*. 1966. Vol. 45. P. 2482–2492. DOI: 10.1063/1.1727966.
19. Chan Y.-b. Series expansions from the corner transfer matrix renormalization group method: the hard-squares model // *Journal of Physics A*. 2012. Vol. 45. 085001. DOI: 10.1088/1751-8113/45/8/085001.
20. Lafuente L., Cuesta J. A. Phase behavior of hard-core lattice gases: A fundamental measure approach // *Journal of Chemical Physics*. 2003. Vol. 119. P. 10832–10843. DOI: 10.1063/1.1615511.
21. Kinzel W., Schiek M. Extent of exponent variation in a hard-square lattice gas with second-neighbor repulsion // *Physical Review B*. 1981. Vol. 24. P. 324–328. DOI: 10.1103/PhysRevB.24.324.
22. Feng X., Blöte H. W. J., Nienhuis B. Lattice gas with nearest- and next-to-nearest-neighbor exclusion // *Physical Review E*. 2011. Vol. 83. 061153. DOI: 10.1103/PhysRevE.83.061153.
23. Fiore C. E., da Luz M. G. E. Exploiting a semi-analytic approach to study first order phase transitions // *Journal of Chemical Physics*. 2013. Vol. 138. 014105. DOI: 10.1063/1.4772809.
24. Nath T., Rajesh R. Multiple phase transitions in extended hard core lattice gas models in two dimensions // *arXiv: 1404.6902 V.2 [cond-mat.stat-mech]* 30 Apr 2014.
25. Zhang W., Deng Y. Monte Carlo study of the triangular lattice gas with first- and second-neighbor exclusion // *Physical Review E*. 2008. Vol. 78. 031103. DOI: 10.1103/PhysRevE.78.031103.
26. Мышлявцев А. В., Мышлявцева М. Д. Вычислительные аспекты метода трансфер-матрицы: моногр. Кызыл: ТуВИКОПР СО РАН, 2000. 102 с.

МЫШЛЯВЦЕВ Александр Владимирович, доктор химических наук, профессор (Россия), проректор по учебной работе.

SPIN-код: 1405-0884

AuthorID (РИНЦ): 44784

ResearcherID: H-7654-2013

AuthorID (SCOPUS): 6701836796

МЫШЛЯВЦЕВА Марта Доржукаевна, доктор физико-математических наук, доцент (Россия), заведующая кафедрой «Высшая математика».

SPIN-код: 4952-9267

AuthorID (РИНЦ): 391268

ResearcherID: H-5361-2013

Адрес для переписки: myshlav@mail.ru

Для цитирования

Мышлявцев А. В., Мышлявцева М. Д. Моделирование методом трансфер матрицы решеточного газа жестких частиц на треугольной решетке с исключением вплоть до 3-го соседства // *Омский научный вестник*. 2018. № 3 (159). С. 118–122. DOI: 10.25206/1813-8225-2018-159-118-122.

Статья поступила в редакцию 29.05.2018 г.

© А. В. Мышлявцев, М. Д. Мышлявцева