СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

С 326
Г-129
2593/2-78
19/VI-78

Р17 - 11367

Н.Д.Гагунашвили, В.Б.Приезжев

МЕТОД МОМЕНТОВ В ТЕОРИИ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ БЕЗ САМОПЕРЕСЕЧЕНИЯ

1978

P17 - 11367

Н.Д.Гагунашвили, В.Б.Приезжев

МЕТОД МОМЕНТОВ
В ТЕОРИИ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ
БЕЗ САМОПЕРЕСЕЧЕНИЯ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б. Р17 - 11367

Метод моментов в теории случайных блужданий без самопересечения

Предложен метод решения задачи о случайных блужданиях без самопересечений на целочисленной решетке. Метод основан на анализе моментов функции распределения участков пути специального вида при случайном блуждании на решетке. Даны формально точные выражения для статистической суммы совокупности непересекающихся путей.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Gagunashvili N.D., Priezzhev V.B. P17 - 11367

Method of Momenta for the Self-Avoiding Walk Problem

A method is proposed for solution of the self-avoiding problem on the quadratic lattice. The method is based on consideration of the distribution function moments for some part of self-avoiding walk on the lattice. The formal exact partition function is found for the collection of the self-avoiding walks.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

© 1978 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

Проблема перечисления всех возможных непересекающихся путей на решетке, возникающая в теории случайных блужданий [1], представляет значительный интерес в различных областях статистической физики. К этой проблеме сводится задача о вычислении корреляционных функций и намагниченности в модели Изинга [2]: коэффициент разложения n-го порядка спиновой корреляционной функции $\langle s_1 s_2 \rangle$ определяется числом непересекающихся путей, которыми можно за n шагов дойти из начала координат в точку r. Еще более естественно эта проблема возникает в модели полимеров с "исключенным объемом", в которой различные участки полимерной цепочки не соприкасаются из-за действия сил отталкивания [3,4]. Не останавливаясь на обзоре многочисленных работ по перечислению непересекающихся путей, следует отметить, что в большинстве этих работ используется техника высокотемпературных разложений, т.е. по существу прямое перечисление числа возможных конфигураций для конечного и не слишком большого числа шагов.

В работах авторов [5-8] был развит аналитический метод вычисления статистических сумм замкнутых непересекающихся путей на бесконечных квадратной и треугольной решетках. В этом методе исходная задача путем введения дефектов решетки приводится к точно решаемой задаче, а затем производится учет влияния введенных дефектов. Основная идея метода состоит в том, что в новой формулировке задача о перечислении непересекающихся путей содержит малый параметр, которым является плотность дефектов в пути. В работах [7,8] учет влияния дефектов был проведен в простом приближении, которое обеспечивало точность определения критической точки порядка 1%-0,1%. Это приближение, несмотря на использование в нем малого параметра, не имело вида разложения в ряд по параметру, и поэтому дальнейшее увеличение точности расчетов было связано с принципиальными трудностями.

В настоящей работе предложен новый метод учета дефектов. Мы вводим в рассмотрение функцию распределения дефектов и находим выражение для ее моментов через корреляционные функции точно решаемой задачи. Это дает возможность получить формально точное представление для статистической суммы в задаче о непересекающихся путях на квадратной решетке. Полученное представление удобно тем, что может быть использовано как источник для построения приближенных решений с последовательно возрастающей точностью. Во втором пункте работы аналогичное точное представление для статистической суммы получено методом включения-исключения. Это представление оказывается более удобным в тех случаях, когда приближение состоит в каком-либо расцеплении введенных нами корреляционных функций. В п.3 приведен простой пример такого расцепления и вычислена статистическая сумма изучаемой модели.

1. МОМЕНТЫ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕФЕКТОВ

Пусть имеется квадратная решетка, состоящая из N узлов, и совокупность непересекающихся замкнутых путей на ней. Задача состоит в определении статистической суммы или производящей функции

$$Z(x) = \sum_{n=0}^{N} g_n x^n , \qquad /1/$$

где g_n - число конфигураций непересекающихся путей, имеющих общее число шагов n .

В работах [5-8] было показано, что статистическая сумма задачи о перечислении непересекающихся путей может быть вычислена точно, если усложнить условия

прохождения пути по решетке. Именно, нужно допустить, что любой узел решетки может быть пройден в вертикальном направлении двумя различными способами. Вертикальный участок пути при таком условии в дальнейшем будем называть дефектом.

Обозначим через g_n^* число конфигураций непересекающихся путей длины n в задаче с дефектами.

Статистическая сумма в этой задаче имеет вид:

$$Z^*(x) = \sum_{n=0}^{N} g_n^* x^n . \qquad /2/$$

Величина g_n^* может быть представлена как сумма по числу дефектов в каждой конфигурации

$$g_n^* = \sum_k \mathcal{F}_k^n , \qquad /3/$$

где $\mathcal{F}_k^n$ - число конфигураций с периметром n, содержащих k дефектов. Пусть далее ϕ_k^n - плотность конфигураций с k дефектами на множестве конфигураций с периметром n .

$$\phi_k^n = \frac{\mathcal{F}_k^n}{g_k^*} . \qquad /4/$$

Тогда, учитывая, что каждый дефект удваивает число возможных путей, запишем статистическую сумму исходной задачи в виде:

$$Z(x) = \sum_n x^n \sum_k \mathcal{F}_k^n 2^{-k} =$$

$$= \sum_n x^n g_n^* \sum_k \phi_k^n 2^{-k} = Z^*(x) \langle \sum_k \phi_k^n 2^{-k} \rangle , \qquad /5/$$

по определению средней величины

$$\langle \dots \rangle = Z^*(x)^{-1} \sum_n x^n g_n^* (\dots).$$

Обозначим через $\rho(x)$ среднюю плотность узлов решетки, которые принадлежат одному из замкнутых многоугольников, определяющих конфигурацию пути. Типичная конфигурация имеет периметр

$$\langle n\rangle_x = N\rho(x). \qquad /6/$$

Средняя величина $\langle \sum_k \phi_k^n 2^{-k}\rangle$ может быть заменена ее значением с типичным периметром

$$\langle \sum_k \phi_k^n 2^{-k}\rangle = \sum_k \phi_k^{\langle n\rangle_x} 2^{-k}, \qquad /7/$$

откуда

$$Z(x) = Z^*(x) \sum_k \phi_k^{\langle n\rangle_x} 2^{-k} = Z^*(x) R(x). \qquad /8/$$

Простое разложение

$$R(x) = \sum_k \phi^{\langle n\rangle_x} 2^{-k} =$$

$$= \sum_k \phi_k^{\langle n\rangle_x} (1 - k\ln 2 + \frac{1}{2!}(k\ln 2)^2 \ldots) =$$

$$= 1 - M_1 \ln 2 + \frac{1}{2!} M_2 (\ln 2)^2 - \frac{1}{3!} M_3 (\ln 2)^3 \ldots \qquad /9/$$

приводит к выражению статистической суммы /1/ через моменты $M_1, M_2, \ldots, M_n, \ldots$ функции распределения дефектов $\phi_k^{\langle n\rangle_x}$ на множестве конфигураций периметра $\langle n\rangle_x$.

Следующим шагом является выяснение связи между моментами $M_1, M_2, \ldots M_n, \ldots$ и корреляционными функциями точно решаемой задачи. Обозначим через $\langle i_1\rangle_x$ среднее число конфигураций, имеющих дефект в узле i_1 и вообще через $\langle i_1, i_2, i_3, \ldots i_n\rangle_x$ – среднее число конфигураций с дефектами в узлах $i_1, i_2, \ldots i_n$.

Рассмотрим сумму

$$\sum_{i_1 \ldots i_r} \langle i_1, i_2 \ldots i_r\rangle_x, \quad 1 \le r \le N, \qquad /10/$$

в которой индексы $i_1 \ldots i_r$ пробегают независимо значения номеров всех N точек решетки. Из эквивалентности ансамблей следует, что коррелятор $\langle i_1 \ldots i_r\rangle_x$ можно рассматривать как среднее на множестве конфигураций с типичным периметром $\langle n\rangle_x$. Выберем из этого множества все конфигурации с k дефектами. Их вклад в сумму /10/ равен $k^r \phi_k^{\langle n\rangle_x}$, поскольку каждый из r индексов имеет k независимых возможностей оказаться номером дефектного узла. Суммирование последнего выражения по всем возможным k приводит к формуле

$$\sum_{i_1 \ldots i_r} \langle i_1, i_2 \ldots i_r\rangle_k = \sum_k \phi_k^{\langle n\rangle_x} k^r = M_r. \qquad /11/$$

Таким образом, мы получаем выражение для статсуммы исходной задачи через статсумму точно решаемой модели $Z^*(x)$ и корреляционные функции произвольного порядка в этой модели. Для расчета корреляторов вида $\langle i_1, \ldots i_r\rangle$ можно использовать технику, развитую в работе [9] для вычисления спиновых корреляций. Пример вычисления корреляторов низшего порядка в модели с дефектами приведен в работах [7,8].

2. УЧЕТ ДЕФЕКТОВ МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ-ИСКЛЮЧЕНИЯ

Полученное выражение статсуммы $Z(x)$ через корреляционные функции $\langle i_1 \ldots i_r\rangle$ содержит бесконечный ряд сумм по независимым индексам $i_1 \ldots i_r$. Последнее обстоятельство затрудняет построение приближенных решений, заключающихся, как правило, в некотором расцеплении корреляций. В самом деле, при расцеплении необходимо учитывать повторяющиеся индексы в выражении для $\langle i_1 \ldots i_r\rangle$, и это делает выкладки громоздкими. Мы получим еще одно формально точное выражение для статсуммы $Z(x)$, более удобное с указанной точки зрения.

При определении дефекта мы условились считать, что путь проходит дефектный узел двумя различными способами. Будем различать теперь эти способы, приписывая первому номер 1, а второму - номер 2. Назовем свойством $P(i_1)$ прохождение узла i_1 вторым способом при условии, что в этом узле имеется дефект. Очевидно, что статсумма исходной задачи содержит все конфигурации, не обладающие ни одним из свойств $P(i_r)$, $1 \le i_r \le N$. Перечисление таких конфигураций можно осуществить, пользуясь принципом включения-исключения. Приведем здесь формулировку этого принципа, взятую из книги М.Холла[10].

Пусть имеется N элементов и некоторое число свойств $P(1)$, $P(2)$ ... $P(n)$. Пусть далее N_i - число элементов со свойством $P(i)$ и вообще $N_{i_1 i_2 \dots i_r}$ - число элементов со свойствами $P(i_1), P(i_2), \dots, P(i_r)$. Тогда число элементов $N(0)$, не обладающих ни одним из указанных свойств, задается формулой обращения

$$N(0) = N - \sum N_i + \sum_{i_1<i_2} N_{i_1 i_2} + \dots$$

$$+ (-1)^s \sum_{i_1<i_2<\dots<i_s} N_{i_1 i_2 \dots i_s} + \dots + (-1)^n N_{1,2\dots n} \quad /12/$$

Пусть теперь элементами полного множества являются все возможные конфигурации с периметром n задачи с дефектами; тогда, согласно принципу включения-исключения, число конфигураций исходной задачи с периметром n равно

$$g_n = g_n^* - \frac{1}{2 \cdot 2!} \sum g_n(i_1) + \dots + \frac{(-1)^n}{2^n n!} \sum g_n(1,2\dots n), \quad /13/$$

где $g_n(i_1 \dots i_n)$ - число путей, содержащих дефект в узлах $i_1 \dots i_r$. Просуммируем обе части равенства /13/ по n, предварительно умножив их на x^n. Получим окончательно

$$Z(x) = Z^*(x)\left(1 - \frac{1}{2 \cdot 2!} \sum_{i_1} \langle i_1 \rangle_x + \dots\right.$$

$$\left. + (-1)^n \frac{1}{2^n n!} \sum_{i_1<i_2<\dots<i_n} \langle i_1 \dots i_n \rangle_x \right). \quad /14/$$

Выражения /8/ и /14/, в принципе, эквивалентны и могли быть получены одним способом, однако использование метода включения-исключения в последнем случае представляется более естественным.

3. ПРИБЛИЖЕННЫЙ РАСЧЕТ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Если приближенно расцепить корреляторы

$$\langle i_1 \dots i_r \rangle = \prod_{k=1}^{r} \langle i_k \rangle \quad /15/$$

в формуле /14/, то выражение для статсуммы принимает следующий вид:

$$Z(x) \simeq Z^*(x)\left(1 - \frac{\langle i_1 \rangle_x}{2}\right)^N$$

Используя приближенное выражение /15/, мы вычислим значение x_c, при котором статсумма исходной задачи имеет особенность. Для этой цели мы представим статсумму $Z(x)$ в виде:

$$Z(x) = \sum g_n^* x^n \Phi(x)^n = Z^*(x\,\Phi(x)) = Z^*(\tilde{x}), \quad /16/$$

произведя замену переменных $\tilde{x} = x\,\Phi(x)$. Смысл "перенормировки" $\Phi(x)$ состоит в том, что она учитывает, сколько дефектов приходится на один шаг пути и, следовательно, во сколько раз число конфигураций g_n меньше числа g_n^*. С другой стороны, статсумма $Z(x)$ исходной задачи представляется в виде

$$Z(x) = Z^* \langle \Phi(x)^n \rangle = Z^*(x)\,\Phi(x)^{\langle n \rangle_x}. \quad /17/$$

Сравнивая представление статсуммы /17/ с представлением /16/, заключаем, что

$$\Phi(x)^{\langle n\rangle_x} = R(x) \qquad \Phi(x) = R(x)^{\frac{1}{\langle n\rangle_x}} \qquad /18/$$

Поскольку $x = \tilde{x}/\Phi(x)$, то для критического значения x_c имеет место равенство

$$x_c = \tilde{x}_c / R(x_c)^{\frac{1}{\langle n\rangle_{x_c}}} , \qquad /19/$$

или, обращаясь к приближению /15/, получаем уравнение относительно x_c

$$x_c = \tilde{x}_c / \left(1 - \frac{\langle i_1\rangle_{x_c}}{2}\right)^{\frac{1}{\rho(x_c)}} . \qquad /20/$$

Выражение для статсуммы $Z^*(x)$, полученное в работе [8], может быть приведено к виду

$$Z^*(x) = \exp\left\{ \frac{N}{2(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \ln\lambda(\alpha,\beta)\, d\alpha\, d\beta \right\}, \qquad /21/$$

где

$$\lambda(\alpha,\beta) = 1 + 4x^2 + 2\sqrt{2}\,x(\cos\alpha + \cos\beta) + 4x^2\cos\alpha\cos\beta, \qquad /22/$$

так что $\tilde{x}_c = 1/2\sqrt{2}$.

Корреляционные функции $\rho(x)$ и $\langle i_1\rangle_x$ имеют, соответственно, вид

$$\rho(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \lambda^{-1}[4x^2 + x\sqrt{2}(\cos\alpha + \cos\beta) + 4x^2\cos\alpha\cdot\cos\beta]\, d\alpha\, d\beta \qquad /23/$$

$$\langle i_1\rangle_x = (1 - A(x))^2 + B(x)C(x), \qquad /24/$$

где

$$A(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \lambda^{-1}[1 + 2x^2 + 2\sqrt{2}\,x\cos\alpha + \sqrt{2}\,x\cos\beta + 2x^2\cos\alpha\cos\beta]\, d\alpha\, d\beta$$

$$B(x) = -\frac{2}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \lambda^{-1}[1 + x\sqrt{2}(\cos\alpha + \cos\beta)]\, d\alpha\, d\beta$$

$$C(x) = \frac{-1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \lambda^{-1}[x\sqrt{2}(1 + 2x^2 + 2\sqrt{2}\,x\cos\alpha) + x^2(1 + x\sqrt{2}\cos\alpha)]\, d\alpha\, d\beta . \qquad /25/$$

Подстановка выражения /23/, /24/, /25/ в уравнение /20/ и последующее решение этого уравнения методом итераций приводит к значению $x_c^{-1} = 2{,}547...$ Этот результат находится в несколько худшем согласии с данными высокотемпературных разложений, чем результат работы [8]. Однако, в отличие от последней, схема получения приближенного решения, предложенная в нашей работе, допускает вычисление критического значения x_c с возрастающей точностью путем учета корреляторов высших порядков.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Спицер Ф. Принципы случайного блуждания. "Мир", М., 1969.*
2. *Фишер М. Природа критического состояния. "Мир", М., 1968.*
3. *Wall F.T., Hiller L.A., Jr., Atchinson W.F. J.Chem. Phys., 1955, 23, p.913.*
4. *Fisher M.E. J.Chem.Phys., 1966, 45, p.1469.*
5. *Приезжев В.Б. ОИЯИ, Р17-9633, Дубна, 1976.*
6. *Приезжев В.Б. ОИЯИ, Р17-9930, Дубна, 1976.*
7. *Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б. ОИЯИ, Р17-10666, Дубна, 1977.*
8. *Приезжев В.Б. ОИЯИ, Р17-10972, Дубна, 1977.*
9. *Монтролл Э.В. В сб.: Устойчивость и фазовые переходы. "Мир", М., 1973.*
10. *Холл М. Комбинаторика, "Мир", М., 1970.*

Рукопись поступила в издательский отдел 3 марта 1978 года.