сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-80-185

В.Б.Приезжев

СТАТИСТИКА ДИМЕРОВ НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ.

1. Точнорешаемая модель

1980

Трехмерная задача о димерах, одна из классических нерешенных задач статистики решеток, может быть сформулирована следующим образом: определим N-брикет как трехмерный параллелепипед объемом N с целочисленными сторонами ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3. Димер является 2-брикетом. Задача состоит в определении числа всех возможных способов "разрезать" N-брикет на $N/2$ димеров. Обозначим это число через f_ℓ. Хаммерсли /1/ показал, что при $\ell_i \to \infty$ $(i=1,2,3)$ величина $N^{-1} \ln f_\ell$ стремится к постоянному пределу λ. Точное значение λ не известно.

В ранней работе Фаулера и Рашбрука /2/ дана оценка $\lambda = 0{,}43$ вместе с точными границами

$$0 \le \lambda \le \frac{1}{2} \ln 3. \qquad /1/$$

После решения двумерной задачи о димерах /3,4/ нижняя оценка приняла вид

$$G/\pi \le \lambda, \qquad /2/$$

где $G = 0{,}915965...$ /постоянная Каталана/. В 1968 г. Хаммерсли /5/ получил для нижней оценки выражение

$$\frac{1}{4\pi^3} \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^\pi d\theta_3 \ln \left\{ 4 \sum_{i=1}^{3} \sin^2 \theta_i \right\} \le \lambda. \qquad /3/$$

Наконец, в 1978 г. Минк /6/ усовершенствовал верхнюю оценку Фаулера и Рашбрука /1/:

$$\lambda \le \frac{1}{12} \ln 6!. \qquad /4/$$

Таким образом, в настоящее время известно, что

$$0{,}418347... \le \lambda \le 0{,}5482709... \qquad /5/$$

В этой статье предложена и решена трехмерная решеточная модель, для которой точное значение λ совпадает с нижней оценкой /3/.

1. МОДЕЛЬ

Представим N-брикет как совокупность N единичных кубов и рассмотрим решетку L, образованную центрами этих кубов. Обозначим координаты точек решетки целыми числами (x_1, x_2, x_3), $(0 \le x_i < \ell_i)$, $(i=1,2,3)$.

Приведенными координатами точки (x_1, x_2, x_3) назовем числа $[k_1, k_2, k_3]$, удовлетворяющие условию

$$k_i \equiv x_i \,(\mathrm{mod}\, 2) \quad (i = 1,2,3).$$

Назовем подрешеткой A_0 все точки решетки L с приведенными координатами $[0,0,0]$ и подрешеткой B_0 все точки с приведенными координатами $[1,1,1]$. Рассмотрим произвольное разбиение N-брикета на димеры. Пусть p_1 и p_2 – пара соседних точек подрешетки A_0, находящихся на расстоянии два друг от друга. Будем говорить, что для любой пары $p_1 p_2$ данное разбиение порождает путь от p_1 к p_2, если димер, содержащий точку p_1, прилегает к единичному кубу, содержащему точку p_2. Последовательность путей $p_1 p_2, p_3 p_4, \ldots, p_{n-1} p_n$ назовем путем из p_1 в p_n. Если в последовательности путей $p_1 p_2, p_2 p_3, \ldots, p_{n-1} p_n$ точки p_1 и p_n совпадают, путь $p_1 p_n$ замкнут. Аналогично определяется путь на подрешетке B_0.

Теперь мы можем определить нашу модель следующим образом: рассмотрим все разбиения N-брикета со сторонами ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3, не порождающие ни одного замкнутого пути на подрешетках A_0 и B_0; обозначим число таких разбиений через f^*_ℓ. Требуется найти предел

$$\lambda^* = \lim_{\ell_i \to \infty} \frac{1}{N} \ln f^*_\ell \quad (i = 1,2,3). \qquad /6/$$

Решение задачи состоит из двух частей. Сначала мы покажем, что для определения λ^* достаточно решить более простую задачу о перечислении конфигураций димеров, содержащих точки одной подрешетки. Затем эта задача сводится к решенной задаче о случайных блужданиях с возвратом в исходную точку.

2. ФАКТОРИЗАЦИЯ f^*_ℓ

Подрешетки A_0 и B_0 содержат $N/4$ точек решетки L. Оставшиеся $3N/4$ точки решетки L разделим на два множества: подрешетку A_1 и подрешетку B_1. Подрешетка A_1 состоит из точек с приведенными координатами $[1,0,0]$ или $[0,1,0]$, или $[0,0,1]$, подрешетка B_1 состоит из точек с приведенными координатами $[1,1,0]$ или $[1,0,1]$, или $[0,1,1]$.

В любом разбиении N-брикета имеются димеры трех сортов:

(i) димеры, содержащие точки множества A_0;

(ii) димеры, содержащие точки множества B_0;

(iii) димеры, не содержащие точек множества A_0 и B_0.

Попытаемся разбивать N-брикет на димеры, удаляя сначала димеры сорта (i) до тех пор, пока в брикете не останется ни одной точки подрешетки A_0, а затем димеры сорта (ii) до тех пор, пока не останется ни одной точки подрешетки B_0. Эти процедуры независимы, т.к. любой димер сорта (i) не пересекается ни с одним димером сорта (ii). Возникает вопрос: всегда ли можно разделить оставшийся объем на димеры? Ответ на этот вопрос дает следующая теорема:

Теорема 1. Пусть $D(A_0)$ и $D(B_0)$ – конфигурации димеров сорта (i) и сорта (ii), содержащие все точки подрешеток A_0 и B_0 и не порождающие на этих подрешетках ни одного замкнутого пути. Тогда объем, полученный в результате удаления из N-брикета всех димеров, принадлежащих $D(A_0)$ и $D(B_0)$, может быть разбит на димеры единственным способом.

Оставшаяся часть этого параграфа будет посвящена доказательству теоремы 1, но прежде мы приведем следствие, вытекающее из нее.

Обозначим число всех возможных конфигураций $D(A_0)$ /равное из-за симметрии числу всех возможных конфигураций $D(B_0)$ / через ϕ_ℓ. Тогда в силу теоремы 1 для искомого числа разбиений N-брикета имеем соотношение

$$f^*_\ell = (\phi_\ell)^2 . \qquad /7/$$

Рассмотрим теперь объем V, полученный из N-брикета вследствие удаления двух произвольных конфигураций димеров $D(A_0)$ и $D(B_0)$, удовлетворяющих условиям теоремы 1. Обозначим через L_v подмножество точек решетки L, принадлежащих V. Через G обозначим граф с вершинами L_v и ребрами, соединяющими все пары вершин, находящиеся на единичном расстоянии друг от друга. Как обычно, степенью вершины p /обозначается через $\deg p$ / будем называть число ребер, инцидентных этой вершине. Каждая вершина графа G принадлежит либо подрешетке A_1, либо подрешетке B_1. Ближайшими соседями вершины, принадлежащей подрешетке A_1, являются вершины из подрешетки B_1, и наоборот.

Пусть $a_1 \in A_1$ – некоторая произвольно выбранная вершина графа G со степенью $\deg a_1 > 2$. Удалим из графа G все ребра, инцидентные a_1, кроме двух произвольно выбранных ребер r_1 и r_1'. В оставшемся графе выберем связную компоненту $G(a_1; r_1, r_1')$, содержащую вершину a_1 и ребра r_1 и r_1'. Пусть далее $a_2 \in A_1$ – некоторая вершина графа $G(a_1; r_1, r_1')$ со степенью $\deg a_2 > 2$. Снова выберем среди инцидентных ей ребер два ребра r_2 и r_2', удалив остальные. Связная компонента полученного графа, содержащая a_2, есть граф $G(a_1; r_1, r_1' | a_2; r_2, r_2')$. Продолжая эту процедуру далее, мы получим подграф $G(a_1; r_1, r_1' | \ldots | a_k; r_k, r_k')$ графа G, не содержащий ни одной вершины $a \in A_1$ со степенью $\deg a > 2$. Назовем этот подграф A_1-подграфом. Если граф G не имеет вершин $a \in A_1$ с $\deg a > 2$, то он совпадает со своим A_1-подграфом. Аналогично строится B_1-подграф.

Имеет место следующая лемма:

Лемма 1. Любой A_1-подграф графа G содержит хотя бы одну вершину $a \in A_1$ с $\deg a = 1$, и любой B_1-подграф графа G содержит хотя бы одну вершину $b \in B_1$ с $\deg b = 1$.

Доказательство. Предположим обратное, т.е. что существует A_1 -подграф графа G, у которого все вершины, принадлежащие подрешетке A_1, имеют степень 2. Для каждой вершины $b_i \in B_1$ этого A_1-подграфа построим квадратную площадку /плакет/ размером 2x2 с центром в точке b_i и с вершинами, принадлежащими подрешетке A_0. Сторона плакета либо занята вершиной A_1-подграфа $a_j \in A_1$ с $\deg a_j = 2$, либо свободна, т.е. не содержит вершин A_1 -подграфа. В первом случае эта сторона является общей для двух прилегающих друг к другу плакетов.

Набор плакетов не может ограничивать замкнутый объем, т.к. это означало бы, что конфигурация $D(B_0)$ порождает пути, не выходящие из ограниченного объема. Эти пути не имеют точек окончания /из каждой точки подрешетки B_0, находящейся в этом объеме, выходит один путь/ и, следовательно, содержат точку возврата в противоречии с условиями теоремы 1.

Если набор плакетов не ограничивает замкнутого объема, существует по крайней мере одна свободная замкнутая граница, т.е. последовательность сторон плакетов, не содержащих точек A_1 -подграфа и образующих замкнутый контур Γ. В последовательности смежных точек решетки L, принадлежащих Γ, $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}, \gamma_n$ / n -четно/ чередуются точки, принадлежащие подрешетке A_0 и подрешетке A_1. Пары элементарных кубов, соответствующих парам $(\gamma_1, \gamma_2), (\gamma_3, \gamma_4), \dots, (\gamma_{n-1}, \gamma_n)$, образуют последовательность димеров, которые по построению принадлежат $D(A_0)$, и порождают замкнутый путь, что противоречит условию теоремы 1.

Аналогично доказывается существование вершины $b \in B_1$ со степенью единица в любом B_1-подграфе.

Следствие. Граф G содержит хотя бы одну вершину $a \in A_1$ с $\deg A_1 = 1$ и хотя бы одну вершину $b \in B_1$ с $\deg b = 1$. Заметим теперь, что каждому разбиению объема V на димеры соответствует разбиение графа G на непересекающиеся пары смежных вершин. Теорема 1 будет доказана, если мы найдем такой способ последовательного удаления пар смежных вершин и инцидентных им ребер, когда для остающегося на каждом шаге графа сохраняется справедливость леммы 1. Действительно, тогда в каждом из возникающих графов существуют по крайней мере две вершины a и b со степенью единица, принадлежащие подрешеткам A_1 и B_1, и мы можем в качестве очередной пары выбрать вершину a и смежную ей вершину вплоть до последнего шага, когда оставшийся граф есть пара смежных вершин a и b.

Доказательство теоремы 1. Пусть лемма 1 справедлива для связанного графа G^n /обобщение на многосвязный случай элементарно/, полученного из G в результате последовательного удаления n пар смежных вершин. Пусть, далее, $a_0 \in A_1$ - произвольно выбранная вершина графа G со степенью $\deg a_0 = 1$ и $b_0 \in B_1$ - вершина графа G^n, смежная с a_0. Рассмотрим случай $\deg b_0 > 1$, т.к. если $\deg b_0 = 1$, то G^n - пара смежных вершин a_0, b_0, и разбиение графа G закончено.

Удалим из графа G^n пару вершин $a_0 b_0$ вместе с инцидентными им ребрами, получая таким образом граф G^{n+1}. В каждом B_1-подграфе G^{n+1} есть по крайней мере одна вершина $b \in B_1$ с $\deg b = 1$ потому, что такая вершина есть в каждом B_1-подграфе G^n, а удаление пары $a_0 b_0$ не уменьшает числа вершин подрешетки B_1 со степенью единица.

Докажем теперь существование вершины подрешетки A_1 со степенью единица в каждом A_1-подграфе G^{n+1}. В графе G^n $\deg b_0 > 1$, поэтому, кроме вершины a_0, имеется еще не меньше одной /и не более трех/ вершин подрешетки A_1, смежных с b_0. Обозначим их через $a_k (1 \le k \le 3)$. Заметим, что в графе G^n $\deg a_k > 1$ для всех a_k. Действительно, в случае $\deg a_k = 1$ существовал бы B_1 -подграф /с вершинами a_k, b_0, a_0 и ребрами $a_k b_0$, $a_0 b_0$ /, не имеющий вершин подрешетки B_1 со степенью, равной единице.

Если $\deg a_k = n_k$ в графе G^n, то в графе G^{n+1} $\deg a_k = n - 1$, поэтому достаточно рассмотреть случай, когда все $n_k > 2$. В этом случае можно рассматривать каждый A_1 - подграф графа G^{n+1} как A_1 - подграф графа G^n, не содержащий ребер $a_k b_0 (k=1,2,3)$, а в последнем, по условию, имеется хотя бы одна вершина подрешетки A_1 со степенью единица. Теорема 1 доказана, и вместе с ней доказана справедливость соотношения /7/.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ϕ_ℓ

Величина ϕ_ℓ есть число конфигураций димеров сорта (i), не порождающих на подрешетке A_0 замкнутых путей. Слегка изменив терминологию пунктов 1 и 2, сформулируем задачу, которую нужно решить для определения ϕ_ℓ.

Пусть $\mathfrak{L}$ - простая кубическая решетка, состоящая из $\mathfrak{N}$ узлов. Введем в рассмотрение новую систему графов. Мы определим $\mathfrak{G}$ как граф, вершины которого принадлежат $\mathfrak{L}$ и ребрами являются ребра решетки. Пусть $\mathfrak{G}$ есть ориентированный граф, такой, что для каждой пары вершин s и s', связанных ребром $D_{ss'}$, направленным от s к s', имеется ребро, направленное от s' к s. Ориентированным маршрутом или ормаршрутом [7] называется последовательность ориентированных ребер /дуг/, такая, что начало последующей дуги совпадает с концом предыдущей: $D_{i_1 i_2}, D_{i_2 i_3}, \dots, D_{i_{k-1} i_k}$. Для сокращения записи пронумеруем все пары $(D_{ss'}, D_{s's})$ противоположно ориентированных дуг и обозначим одну из дуг i-той пары /все равно какую/ символом D_i^+, а другую – D_i^-. Там, где это не вызовет недоразумений, знаки $\pm$ опустим. В ормаршруте начало и конец могут совпадать, тогда он называется циклическим. Периодическим циклическим ормаршрутом называется ормаршрут, для которого существует представление в виде $(D_{i_1}, D_{i_2}, \dots, D_{i_k})^m$, где $m > 1$ – целое. Непериодические циклические ормаршруты будем называть циклами. Элементарным циклом называется цикл, в котором все вершины проходятся по одному разу. Элементарным подграфом $g \in \mathcal{G}$ будем называть граф, состоящий из одного или из совокупности элементарных циклов, не имеющих общих вершин.

Выберем решетку $\mathfrak{L}$, совпадающую с подрешеткой A_0, так что теперь $\mathfrak{N} = N/8$. В соответствии с прежним определением ϕ_ℓ есть число всех подграфов $g_\ell \in \mathcal{G}$, таких, что из каждой вершины $s \in \mathcal{G}$ выходит ровно одна направленная дуга, причем подграф g_ℓ не содержит ни одного элементарного цикла.

Идея решения состоит в том, чтобы перечислить сначала все элементарные подграфы с определенными весовыми множителями, а затем, воспользовавшись комбинаторным принципом включения-исключения, перечислить интересующие нас подграфы, не содержащие ни одного элементарного цикла.

Введем взвешенный цикл. Припишем обеим дугам D_i^+ и D_i^- вес $\omega(i)$ и будем считать, что $\omega(i) = z_k$, если i-тая дуга ориентирована вдоль орта $e_k (k=1,2,3)$. Весом $W(p)$ цикла $p = D_{i_1} D_{i_2} \dots D_{i_k}$ назовем произведение $(-1)\,\omega(i_1)\,\omega(i_2)\dots\omega(i_k)$. Соответственно весом подграфа g, состоящего из элементарных циклов $p_1, p_2, p_3 \dots p_n$, назовем произведение $\chi(g) = \prod_{i=1} W(p_i)$. Пустому подграфу припишем вес 1. В работе [7] доказана следующая теорема:

Теорема 2. Произведение $\prod_p (1 + W(p))$ по всем возможным циклам графа $\mathcal{G}$ равно сумме $\sum_g \chi(g)$ по всем элементарным подграфам графа $\mathcal{G}$, включая пустой подграф:

$$\prod_p (1 + W(p)) = \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi(g). \qquad /8/$$

При вычислении правой части равенства /8/ воспользуемся периодическими граничными условиями, т.е. будем рассматривать решетку, полученную вследствие соединения противоположных граней исходной решетки $\mathfrak{L}$. Замечание об эквивалентности граничных условий для предельного значения величины $N^{-1} \ln f_\ell$ содержится в работе Хаммерсли [5].

На основании равенства /8/ имеем

$$\ln \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi(g) = \ln \prod_p (1 + W(p)) = \ln \prod_p [1 - (-W(p))] =$$
$$= -\sum_p \Big[\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-W(p))^j}{j} \Big] = -\mathfrak{N} \sum_{N_1+N_2+N_3 \geq 2} \frac{S(N_1, N_2, N_3)\, Z_1^{N_1} Z_2^{N_2} Z_3^{N_3}}{N_1 + N_2 + N_3}, \qquad /9/$$

где $S(N_1, N_2, N_3)$ – число всех возможных замкнутых путей, начинающихся и оканчивающихся в одной точке без ограничений на периодичность. Каждый путь проходит N_i дуг, ориентированных вдоль орта e_i. Последняя сумма в равенстве /9/ умножена на $\mathfrak{N}$, так как замкнутый путь может начинаться в любом узле решетки $\mathfrak{L}$; знаменатель $N_1 + N_2 + N_3$ возник из-за того, что замкнутый путь длины $N_1 + N_2 + N_3$ может иметь любой из содержащихся в нем узлов в качестве исходного. Пусть $\beta(m_1, m_2, m_3; r_1, r_2, r_3)$ – сумма всех возможных путей на трехмерной целочисленной решетке $\mathfrak{L}$ из узла с координатами $(0,0,0)$ в узел с координатами (m_1, m_2, m_3), причем каждый путь содержит r шагов вдоль оси e_i $(1 \leq i \leq 3)$. Пусть $\beta(m_1, m_2, m_3; 0,0,0) = \delta_{m_1 0} \delta_{m_2 0} \delta_{m_3 0}$. По определению, имеем $S(r_1, r_2, r_3) = \beta(0,0,0; r_1, r_2, r_3)$. Сумма $\beta(m_1, m_2, m_3; r_1, r_2, r_3)$ удовлетворяет следующему рекуррентному соотношению:

$$\beta(m_1, m_2, m_3; r_1, r_2, r_3) = \beta(m_1 - 1, m_2, m_3; r_1 - 1, r_2, r_3) +$$
$$+ \beta(m_1 + 1, m_2, m_3; r_1 - 1, r_2, r_3) + \beta(m_1, m_2 - 1, m_3; r_1, r_2 - 1, r_3) +$$
$$+ \beta(m_1, m_2 + 1, m_3; r_1, r_2 - 1, r_3) + \beta(m_1, m_2, m_3 - 1; r_1, r_2, r_3 - 1) + \qquad /10/$$
$$+ \beta(m_1, m_2, m_3 + 1; r_1, r_2, r_3 - 1).$$

Определим фурье-преобразование $\beta(m_1, m_2, m_3; r_1, r_2, r_3)$ с помощью равенств

$$B(a_1, a_2, a_3; r_1, r_2, r_3) = \frac{1}{\mathfrak{N}} \sum_{m_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1} \sum_{m_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1} \sum_{m_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1} \beta(m_1, m_2, m_3; r_1, r_2, r_3) \exp\Big\{-2\pi i \sum_{j=1}^{3} \frac{2 a_j m_j}{\ell_j}\Big\},$$

$$\beta(m_1, m_2, m_3; r_1, r_2, r_3) = \sum_{m_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1} \sum_{m_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1} \sum_{m_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1} B(a_1, a_2, a_3; r_1, r_2, r_3) \exp\Big\{2\pi i \sum_{j=1}^{3} \frac{2 a_j m_j}{\ell_j}\Big\}. \qquad /11/$$

Введем производящие функции

$$F(a_1,a_2,a_3;z_1,z_2,z_3)=\sum_{r_1\ge 0}\sum_{r_2\ge 0}\sum_{r_3\ge 0} B(a_1,a_2,a_3;r_1,r_2,r_3)\,z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3},$$

$$f(m_1,m_2,m_3;z_1,z_2,z_3)=\sum_{r_1\ge 0}\sum_{r_2\ge 0}\sum_{r_3\ge 0}\beta(m_1,m_2,m_3;r_1,r_2,r_3)\,z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3}. \qquad /12/$$

Тогда на основании /10/ имеем

$$\begin{aligned} f(m_1,m_2,m_3;z_1,z_2,z_3) &= \delta_{m_1 0}\,\delta_{m_2 0}\,\delta_{m_3 0} + z_1 f(m_1-1,m_2,m_3;z_1,z_2,z_3) + \\ &+ z_1 f(m_1+1,m_2,m_3;z_1,z_2,z_3) + z_2 f(m_1,m_2-1,m_3;z_1,z_2,z_3) + \\ &+ z_2 f(m_1,m_2+1,m_3;z_1,z_2,z_3) + z_3 f(m_1,m_2,m_3-1;z_1,z_2,z_3) + z_3 f(m_1,m_2,m_3+1;z_1,z_2,z_3), \end{aligned} \qquad /13/$$

$$\begin{aligned} F(a_1,a_2,a_3;z_1,z_2,z_3) &= \frac{1}{\mathfrak{N}} + F(a_1,a_2,a_3;z_1,z_2,z_3)\Big[z_1\exp\Big\{-\frac{2\pi i a_1}{\ell_1/2}\Big\} + z_1\exp\Big\{\frac{2\pi i a_1}{\ell_1/2}\Big\} + \\ &+ z_2\exp\Big\{-\frac{2\pi i a_2}{\ell_2/2}\Big\} + z_2\exp\Big\{\frac{2\pi i a_2}{\ell_2/2}\Big\} + z_3\exp\Big\{-\frac{2\pi i a_3}{\ell_3/2}\Big\} + z_3\exp\Big\{\frac{2\pi i a_3}{\ell_3/2}\Big\}\Big]. \end{aligned} \qquad /14/$$

Откуда

$$F(a_1,a_2,a_3;z_1,z_2,z_3)=\frac{1}{\mathfrak{N}}\,\frac{1}{1-R(z_1,z_2,z_3)}=\frac{1}{\mathfrak{N}}\sum_{j=0}^{\infty}R^j(z_1,z_2,z_3), \qquad /15/$$

где

$$R(z_1,z_2,z_3)=2\sum_{j=1}^{3} z_j\cos\frac{2\pi a_j}{\ell_j/2}. \qquad /16/$$

Из равенства /15/ в соответствии с /12/ легко получить

$$\sum_{\substack{r_1,r_2,r_3\ge 0\\ r_1+r_2+r_3\ge 1}}\frac{B(a_1,a_2,a_3;r_1,r_2,r_3)\,z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3}}{r_1+r_2+r_3}=\frac{1}{\mathfrak{N}}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{R^j(z_1,z_2,z_3)}{j}= \qquad /17/$$

$$=\frac{1}{\mathfrak{N}}\ln(1-R(z_1,z_2,z_3))$$

или, пользуясь преобразованиями /11/,

$$\sum_{\substack{r_1,r_2,r_3\ge 0\\ r_1+r_2+r_3\ge 1}}\frac{\beta(m_1,m_2,m_3;r_1,r_2,r_3)\,z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3}}{r_1+r_2+r_3}= \qquad /18/$$

$$=-\frac{1}{\mathfrak{N}}\sum_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\sum_{a_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\sum_{a_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1}\exp\Big\{2\pi i\Big(\sum_{j=1}^{3}\frac{m_j a_j}{\ell_j}\Big)\Big\}\ln(1-R(z_1,z_2,z_3)).$$

Для интересующего нас случая блуждания с возвратом в исходную точку имеем

$$\sum_{\substack{r_1,r_2,r_3\ge 0\\ r_1+r_2+r_3\ge 1}}\frac{\beta(0,0,0;r_1,r_2,r_3)\,z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3}}{r_1+r_2+r_3}=-\frac{1}{\mathfrak{N}}\sum_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\sum_{a_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\sum_{a_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1}\ln(1-R(z_1,z_2,z_3)). \qquad /19/$$

Учитывая равенства /9/ и определение $S(r_1,r_2,r_3)$, получим для суммы по всем взвешенным элементарным подграфам $g\in\mathcal{G}$

$$\ln\sum_{g\in\mathcal{G}}\chi(g)=-\mathfrak{N}\sum_{r_1+r_2+r_3\ge 1}\frac{S(r_1,r_2,r_3)\,z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3}}{r_1+r_2+r_3}=\sum_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\sum_{a_2=1}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\sum_{a_3=1}^{\frac{\ell_3}{2}-1}\ln(1-R(z_1,z_2,z_3)). \qquad /20/$$

Рассмотрим все подграфы $\mathcal{G}$, такие, что из каждой вершины $\mathfrak{L}$ выходит ровно одна дуга. Полное число таких подграфов, содержащих r_i дуг, ориентированных вдоль $\vec{e}_i$, равно коэффициенту $z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3}$ в разложении производящей функции:

$$\psi(z_1,z_2,z_3)=(2z_1+2z_2+2z_3)^{\mathfrak{N}}. \qquad /21/$$

Для определения ϕ_ℓ нужно исключить из этого числа подграфы, содержащие хотя бы один элементарный цикл. Пользуясь формулой /20/, мы можем найти выражение для суммы $N(r_1,r_2,r_3)$ подграфов, полностью состоящих из циклов с r_i дугами, ориентированными вдоль $\vec{e}_i$, причем каждый подграф входит в $N(r_1,r_2,r_3)$ с множителем $(-1)^k$, где k – число циклов в данном подграфе. Напишем равенство /20/ в виде

$$\sum_{g\in\mathcal{G}}\chi(g)=\prod_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\prod_{a_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\prod_{a_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1}\Big(1+\sum_{j=1}^{3}(z_j e^{\alpha_j}+z_j e^{-\alpha_j})\Big), \qquad /22/$$

где $\alpha_j=4\pi i a_j/\ell_j$ $(1\le j\le 3)$. Из определения $\chi(g)$ следует, что сумма $N(r_1,r_2,r_3)$ равна коэффициенту при $z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3}$ в разложении правой части равенства /22/.

Объединим /21/ и /22/ в форму

$$\prod_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\ \prod_{a_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\ \prod_{a_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1}\ \sum_{j=1}^{3}\left(2\tilde{z}_j + z_j e^{\alpha_j} + z_j e^{-\alpha_j}\right) \qquad /23/$$

и рассмотрим коэффициент при члене $(\tilde{z}_1^{r'_1}\tilde{z}_2^{r'_2}\tilde{z}_3^{r'_3})(z_1^{r_1}z_2^{r_2}z_3^{r_3})$, в котором $r_1+r'_1=R_1$, $r_2+r'_2=R_2$, $r_3+r'_3=R_3$. Этот коэффициент равен сумме $N(r_1,r_2,r_3|r'_1,r'_2,r'_3)$ по всем подграфам, в которых $r_1+r_2+r_3$ дуг объединены в циклы, каждый из которых дает множитель /-1/, а остальные $r'_1+r'_2+r'_3$ дуг выходят из оставшихся $r'_1+r'_2+r'_3$ точек решетки в произвольном направлении. Тогда коэффициент при $z_1^{R_1}z_2^{R_2}z_3^{R_3}$ в разложении выражения

$$\prod_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\ \prod_{a_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\ \prod_{a_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1}\ \sum_{j=1}^{3}\left(2z_j + z_j e^{\alpha_j} + z_j e^{-\alpha_j}\right) \qquad /24/$$

равен

$$\sum_{r_1\geq 0}^{R_1}\ \sum_{r_2\geq 0}^{R_2}\ \sum_{r_3\geq 0}^{R_3} N(r_1,r_2,r_3|R_1-r_1,R_2-r_2,R_3-r_3)\,. \qquad /25/$$

Теперь мы обладаем необходимым материалом для того, чтобы, воспользовавшись принципом включения-исключения, получить выражение для ϕ_ℓ.

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

$$N(0) = N - \sum_i N_i + \sum_{i_1<i_2} N_{i_1 i_2} - \ldots + (-1)^s \sum_{i_1<i_2<\ldots<i_s} N_{i_1 i_2 \ldots i_s} + \ldots + (-1)^n N_{12\ldots n}\,. \qquad /26/$$

Для решения задачи пронумеруем числами $1,2,\ldots,n$ все возможные одиночные циклы на изучаемой решетке. Рассмотрим подграфы $\mathcal{G}^{R_1R_2R_3} \subset \mathcal{G}$, такие, что из каждой вершины решетки $\mathcal{L}$ выходит одна дуга; число дуг в направлении $\pm\vec{e}_i$ есть R_i. Будем считать, что подграф $\mathcal{G}^{R_1R_2R_3}$ обладает свойством $p(i)$, если он содержит i-тый цикл. Пусть $N_{i_1,i_2,\ldots,i_r}$ - число подграфов, содержащих циклы $i_1, i_2, \ldots, i_r$. Тогда полное

число подграфов $\mathcal{G}^{R_1R_2R_3}$, не содержащих ни одного цикла, определяется правой частью равенства /26/. Но согласно определению сумма /25/ в точности равна правой части /26/, так как содержит все члены $N_{i_1 i_2 \ldots i_s}$ с правильными знаками.

Следовательно, производящая функция для подграфов $\mathcal{G}^{R_1R_2R_3}$, не содержащих ни одного цикла, равна

$$\phi(z_1,z_2,z_3) = \sum_{\substack{R_1\geq 0,\,R_2\geq 0,\,R_3\geq 0\\ R_1+R_2+R_3=\mathfrak{N}}} z_1^{R_1}z_2^{R_2}z_3^{R_3}\left\{\sum_{j=1}^{3}\ \sum_{r_j\geq 0}^{R_j} N(r_1,r_2,r_3|R_1-r_1,R_2-r_2,R_3-r_3)\right\} =$$

$$= \prod_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\ \prod_{a_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\ \prod_{a_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1}\ \sum_{j=1}^{3}\left(2z_j + 2z_j\cos\frac{2\pi a_j}{\ell_j/2}\right). \qquad /27/$$

Искомая величина ϕ_ℓ равна

$$\phi_\ell = \phi(1,1,1) = \exp\left\{\sum_{a_1=0}^{\frac{\ell_1}{2}-1}\ \sum_{a_2=0}^{\frac{\ell_2}{2}-1}\ \sum_{a_3=0}^{\frac{\ell_3}{2}-1} \ln\left[4\left(\sum_{j=1}^{3}\sin^2\frac{2\pi a_j}{\ell_j}\right)\right]\right\}. \qquad /28/$$

При $\ell_1, \ell_2, \ell_3 \to \infty$ эта величина стремится к тройному интегралу и, пользуясь соотношениями /6/, /7/, мы получаем

$$\lambda^* = \lim_{\ell_i\to\infty}\frac{1}{N}\ln\phi_\ell^2 = \frac{1}{4\pi^3}\int_0^\pi d\theta_1\int_0^\pi d\theta_2\int_0^\pi d\theta_3 \ln\left(4\sum_{j=1}^{3}\sin^2\theta_j\right). \qquad /29/$$

Таким образом, мы видим, что трехмерная задача о димерах становится точнорешаемой, если к стандартным требованиям модели добавляется "многочастичное" взаимодействие между димерами, обусловленное запрещением циклов на подрешетках исходной решетки. Сравнение величины $\lambda^*=0{,}418$ с оценкой $\lambda=0{,}446$, полученной с помощью техники разложений [8], показывает, что вклад в λ от запрещенных конфигураций сравнительно мал.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hammersley J.M. Research Papers in Statistics. Festschrift für J.Neyman. 1966, p.125-146.
2. Fowler R.Z., Rushbrooke G.S. Trans.Faraday Soc., 1937, 33, p.1272-1294.

3. Fisher M.E. Phys.Rev., 1961, 124, p.1664-1672.
4. Kasteleyn P.W. Physica, 1961, 27, p.1209-1225.
5. Hammersley J.M. Proc. Cambridge Philos.Soc., 1968, 64, p.455-463.
6. Minc H. Math.Proc.Camb.Phil.Soc.,1978, 83, p.461-462.
7. Priezzhev V.B. Theor.Math.Phys., 1976, 31, p.337-345.
8. Nagle J.F. Phys.Rev., 1966, 152, p.190-197.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 марта 1980 года.