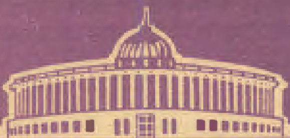
СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



Р17 - 9633

В.Б.Приезжев

К ПРОБЛЕМЕ СЛУЧАЙНОГО БЛУЖДАНИЯ БЕЗ САМОПЕРЕСЕЧЕНИЙ

1976

P17 - 9633

В.Б.Приезжев

К ПРОБЛЕМЕ СЛУЧАЙНОГО БЛУЖДАНИЯ БЕЗ САМОПЕРЕСЕЧЕНИЙ

Случайный путь без самопересечений является математической моделью длинной макромолекулы, различные участки которой не соприкасаются из-за действия сил отталкивания. Возникающая здесь проблема "исключенного объема" является одной из важных нерешенных проблем статистической механики [1]. Другой моделью, приводящей в случае двухмерной решетки к проблеме случайных блужданий без самопересечений, является модель плоских доменов [2]. В этой модели домен рассматривается как область, ограниченная замкнутым путем, в котором каждое ребро и каждая вершина встречаются не более одного раза. Задача состоит в перечислении всех доменных конфигураций, включая многосвязные. Естественно ожидать, что система доменов подобно известной модели Изинга, обладает критическим поведением. Если ребру, являющемуся доменной границей, приписать определенный статистический вес x, то критическое значение x_c, соответствующее температуре фазового перехода, может быть связано с предельной характеристикой случайных блужданий. Пусть u_n - число всех возможных путей без самопересечений на данной решетке, начинающихся в начале координат и возвращающихся в исходную точку после n шагов. Можно показать [3], что если существует предел $\nu = \lim_{n\to\infty} u_{n+1}/u_n$, то он равен обратному значению критического статистического веса x_c в соответствующей задаче о доменах.

Данная работа является введением в серию работ, посвященных исследованию случайных блужданий без самопересечений и нахождению предела ν. Мы начинаем это исследование с задачи о двухмерном блуждании по решетке специального вида, для которой статистическая сумма может быть вычислена точно.

2. *Модель*

Рассмотрим плоскую квадратную решетку, имеющую M столбцов и N строк и свернутую в тор для создания периодических граничных условий. Каждое ребро может оказаться участком доменной границы - тогда будем называть его занятым, в противном случае - назовем ребро свободным. Аналогично, узел назовем занятым или свободным в зависимости от того, является ли он концом занятого ребра или нет. В каждом занятом узле могут встречаться только два занятых ребра. Каждому занятому ребру припишем статистический вес $x = \exp\{-J / kT\}$, где J - энергия единичного участка доменной стенки, T - температура. Эти условия определяют задачу о доменах на квадратной решетке.

Теперь усложним условия случайного блуждания и придем соответственно к модифицированному варианту задачи о доменах. Будем считать, что блуждание осуществляется по решетке, каждый узел которой имеет вид "перекрестка", изображенного на *рис. 1*

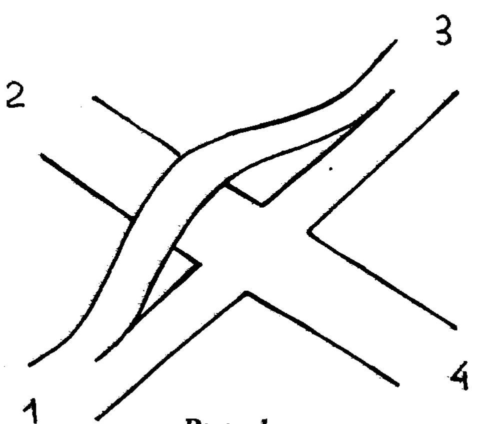


Рис. 1

Для пути, полходящего к узлу со стороны ребра 4 по-прежнему имеются три равновероятные возможности продолжения. То же относится и к ребру 2. Однако, в отличие от обычной квадратной решетки, в случае подхода к узлу со стороны ребра 1 имеются две равновероятные возможности достижения ребра 3 и две возможности поворота /к ребрам 2 и 4/. "Развилка" со стороны ребра 3 выглядит так же. Назовем решетку с таким правилом обхода узлов решеткой с мостиками. Потребует теперь, чтобы случайный путь был самоизбегающим, т.е. каждое ребро и каждый узел - "перекресток" - встречались в нем не более одного раза. В соответствующей такому способу блуждания системе доменов содержатся точно те же доменные конфигурации, что и в прежней задаче. Однако, если раньше различные доменные конфигурации встречались в статсумме по одному разу, то теперь одна и та же конфигурация входит в нее дополнительным фактором $2^{\mathcal{N}}$, где $\mathcal{N}$ - число узлов, в которые входят два вертикальных занятых ребра. Статистический вес вертикального занятого ребра обозначим через y, горизонтального - через x. Задача состоит в нахождении статистической суммы

$$Z = \sum_{N_1 N_2} g(N_1, N_2)\, x^{N_1} y^{N_2}, \qquad /1/$$

где $g(N_1, N_2)$ - число доменных конфигураций, содержащих N_1 горизонтальных и N_2 вертикальных ребер. Вычислив статсумму и определив критическую температуру, мы можем в изотропном случае $x = y$ выразить через критическое значение активности искомый предел

$$\frac{1}{x_c} = \nu = \lim_{n \to \infty} u_{n+1} / u_n, \qquad /2/$$

где u_n - число замкнутых путей без самопересечений на решетке с мостиками.

3. *Эквивалентная задача*

Метод, которым мы воспользуемся для решения поставленной задачи, заключается в сведении ее к некоторой эффективной задаче о димерах [4,5]. Условимся считать ребро занятым, если на нем находится димер. Задача о димерах состоит в перечислении всех возможных покрытий решетки димерами, таких, чтобы никакие два занятых ребра не соприкасались между собой. Требуется найти решетку, для которой существовало бы однозначное соответствие между конфигурацией димеров и доменов на решетке с мостиками. Четыре узла такой решетки изображены на *рис. 2*.

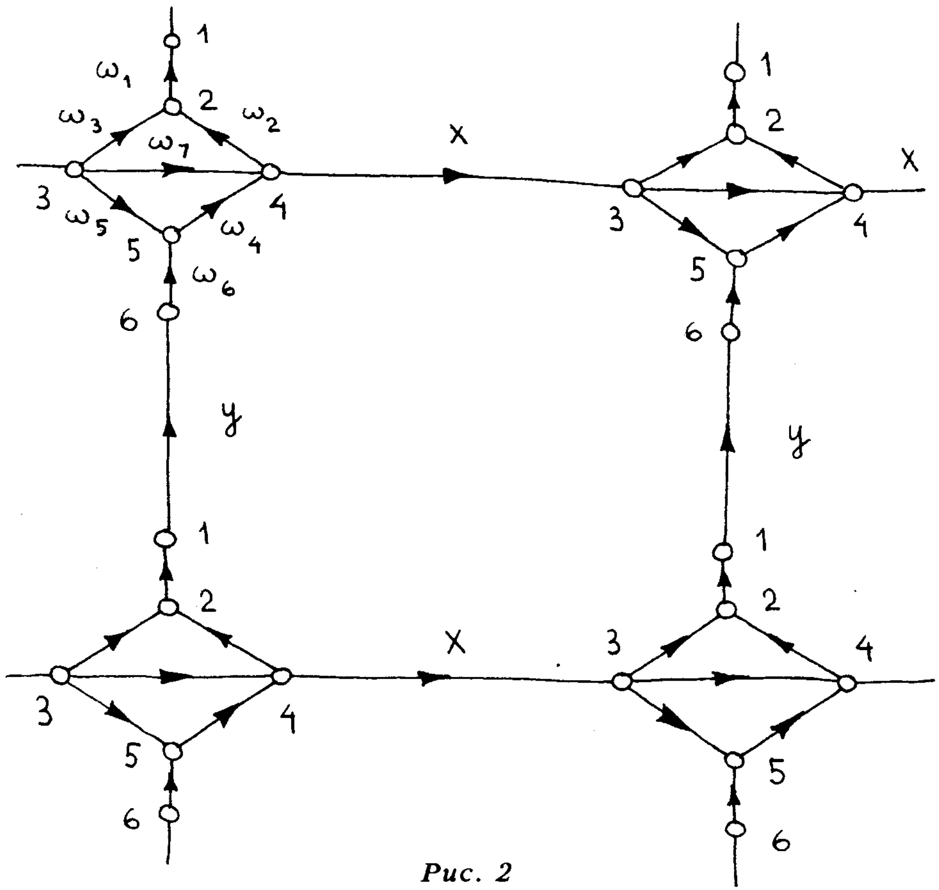


Рис. 2

Соответствие между узлами на решетке с мостиками и в эквивалентной задаче о димерах показано на *рис. 3*.

Мы видим, что узельной конфигурации /7/ в задаче о доменах соответствуют две димерные конфигурации,

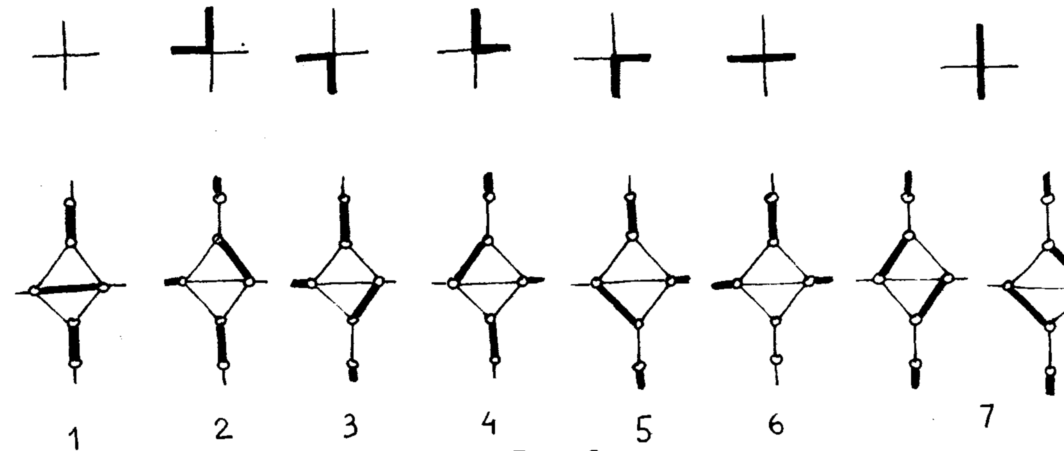


Рис. 3

как и требуется по условию прохождения узла с мостиком в вертикальном направлении. Перечисление димерных конфигураций осуществляется с помощью производящей функции

$$\phi(x, y, \omega_1, \dots, \omega_7) =$$

$$= \sum_{\substack{N_1, N_2 \\ M_1, \dots, M_7}} g(N_1, N_2, M_1, \dots, M_7)\, x^{N_1} y^{N_2} \omega_1^{M_1} \dots \omega_7^{M_7}, \qquad /3/$$

где $g(N_1, N_2, M_1, \dots, M_7)$ - число димерных конфигураций с N_1-димерами, расположенными на горизонтальных связях между узлами, N_2 - на вертикальных и M_i димеров на ребрах, которым приписан вес ω_i /см. *рис. 2*/. Ввиду установленной эквивалентности между димерами и доменными конфигурациями, полагая $\omega_i = 1 (i = 1, 2, \dots, 7)$, имеем

$$\phi(x, y, 1, \dots, 1) = Z(x, y).$$

Таким образом, мы свели задачу о доменах на решетке с мостиками к задаче о димерах на декорированной решетке.

4. Перечисление димерных конфигураций

Решение задачи о димерах можно найти методом пфаффиана /4/. Полное изложение этого метода содержится в работах /4,5/, поэтому дальнейшие выкладки не сопровождаются определениями. Прежде чем вводить пфаффиан, мы должны убедиться в том, что решетка на *рис. 2* удовлетворяет условию теоремы Кастеляйна /6/, т.е. что можно снабдить каждое ребро стрелкой так, чтобы каждый элементарный многоугольник при его обходе содержал нечетное число стрелок, направленных по часовой стрелке. Непосредственной проверкой легко убедиться в том, что расположение стрелок на рисунке удовлетворяет этому условию. Пронумеруем теперь все точки решетки $p (p=1,2,\dots,6MN)$. Введем антисимметричную матрицу A порядка $6MN$ с элементами, соответствующими возможным димерным связям. Элемент этой матрицы $a(p,p')$ равен весу ребра, общего точкам p и p', если точки p и p' смежны, положителен, если стрелка на ребре направлена от p к p', и отрицателен, если стрелка направлена от p' к p. Если точки p и p' не смежные $a(p,p')=0$. В работе /4/ показано, что при таком выборе матрицы A производящая функция равна пфаффиану этой матрицы $P\{A\}$, что в нашем случае означает

$$\phi(x,y,\omega_1,\dots,\omega_7) = P\{A\}. \qquad /5/$$

Алгоритм для вычисления пфаффиана дает формула

$$\det A = [P\{A\}]^2. \qquad /6/$$

Вычисление детерминанта значительно упрощается, если матрица является циклической, т.е. $a(p,p')=a(p-p')$, причем $a(N+S)=a(S)$, где N - порядок матрицы. Для того, чтобы сконструировать из матрицы A эквивалентную ей циклическую матрицу, введем новую нумерацию вершин. Поставим в соответствие всем элементарным ячейкам решетки вектора $k\,(k_x=1,2,\dots,M;\ k_y=1,2,\dots,N)$. Точки в элементарной ячейке пронумеруем числами $i\ (i=1,2,\dots,6)$ так, как показано на *рис. 2.* Элементы циклической $MN\times MN$ матрицы B имеют вид

$$b(k,k') = b[k-k'] = \begin{bmatrix} a(k,1;k',1) & \dots & a(k,1;k',6) \\ a(k,2;k',1) & \dots & a(k,2;k',6) \\ \vdots & & \\ a(k,6;k',1) & \dots & a(k,6;k',6) \end{bmatrix}, \qquad /7/$$

где пара (k,i) в аргументе матричного элемента $a(ki;k'i')$ соответствует одной из $6MN$ точек решетки. Для циклической матрицы B порядка MN при $MN\to\infty$ имеет место равенство /4/:

$$\frac{1}{MN}\ln\det B = \frac{1}{(2\pi)^2}\iint_0^{2\pi} \ln\det\lambda(\alpha,\beta)\, d\alpha\, d\beta, \qquad /8/$$

где

$$\lambda(\alpha,\beta) = \sum_{s_x=1}^{M}\sum_{s_y=1}^{N} b(\vec{s})\, e^{i(s_x\alpha+s_y\beta)}. \qquad /9/$$

Поскольку димерные связи могут возникать только внутри элементарной ячейки и между смежными ячейками решетки, от нуля отличны только пять элементов матрицы B, соответствующих четырем направлениям единичного вектора k: $(0,1)$, $(0,-1)$, $(1,0)$, $(-1,0)$ и нулевому вектору $(0,0)$. Выпишем их в явном виде, учитывая определение $a(p,p')$ и обозначения точек в элементарной ячейке, указанное на *рис. 2.*

$$b[(0,0)] = \begin{bmatrix} 0 & -\omega_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \omega_1 & 0 & -\omega_3 & -\omega_2 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_3 & 0 & \omega_7 & \omega_5 & 0 \\ 0 & \omega_2 & -\omega_7 & 0 & -\omega_4 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_5 & \omega_4 & 0 & -\omega_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_6 & 0 \end{bmatrix} \qquad /10/$$

Матрица $b(1,0)$ содержит единственный ненулевой элемент x в четвертой строке и третьем столбце, матрица $b(-1,0)$ - элемент $-x$ в третьей строке и четвертом столбце, матрица $b(0,1)$ - элемент y в первой строке и шестом столбце и, наконец, матрица $b(0,-1)$ - элемент $-y$ в шестой строке и первом столбце.

Согласно формуле /9/, матрица $\lambda(\alpha,\beta)$ имеет вид:

$$\lambda(\alpha,\beta) = \begin{bmatrix} 0 & -\omega_1 & 0 & 0 & 0 & ye^{\beta} \\ \omega_1 & 0 & -\omega_3 & -\omega_2 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_3 & 0 & (\omega_7 - xe^{-\alpha}) & \omega_5 & 0 \\ 0 & \omega_2 & (-\omega_7 + xe^{\alpha}) & 0 & -\omega_4 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_5 & \omega_4 & 0 & -\omega_6 \\ -ye^{-\beta} & 0 & 0 & 0 & \omega_6 & 0 \end{bmatrix} \qquad /11/$$

Полагая $\omega_1 = \omega_2 = \dots \omega_7 = 1$, имеем

$$\det \lambda(\alpha,\beta) = 1 + x^2 + 4y^2 - 2x \cos\alpha + 4y \cos\beta - 4y \cos\alpha \cos\beta. \qquad /12/$$

Подставив это выражение в формулу /8/, получим

$$1/MN \ln \det B = 1/MN \ln \det A = \qquad /13/$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int\int_0^{2\pi} \ln(1 + x^2 + 4y^2 - 2x \cos\alpha + 4y \cos\beta - 4y \cos\alpha \cos\beta) d\alpha\, d\beta.$$

Пользуясь соотношениями /4/, /5/, /6/, получим окончательное выражение для статистической суммы задачи о доменах

$$Z(x,y) = \exp\left\{ \frac{MN}{2(2\pi)^2} \int\int_0^{2\pi} \ln(1 + x^2 + 4y^2 - \right. \qquad /14/$$

$$\left. - 2x \cos\alpha + 4y \cos\beta - 4xy \cos\alpha \cos\beta) d\alpha\, d\beta \right\}$$

в пределе $MN \to \infty$.

Критическое поведение статистических сумм вида /14/ широко известно благодаря решению двухмерной модели Изинга [7]. Для нахождения критических значений x и y нужно положить $\cos\alpha = 1$ и $\cos\beta = -1$, так как при этом аргумент логарифма под знаком интеграла обращается в ноль при выполнении равенства

$$1 + x^2 + 4y^2 - 2x - 4y + 4xy = 0. \qquad /15/$$

Из последнего равенства следует, что критические значения x и y удовлетворяют условию

$$y = \frac{1}{2}(1 - x) \qquad /16/$$

Линия раздела фаз в плоскости xy показана на *рис. 4*.

Высокотемпературная фаза II соответствует неупорядоченному состоянию, в котором преобладает тенденция к образованию большого числа мелких доменов. Фаза I упорядочена. В изотропном случае $x = y$ критическое значение $x = 1/3$. Согласно равенству /2/, мы получаем окончательное значение искомого предела в задаче о случаном блуждании на решетке с мостиками

$$\gamma = 3. \qquad /17/$$

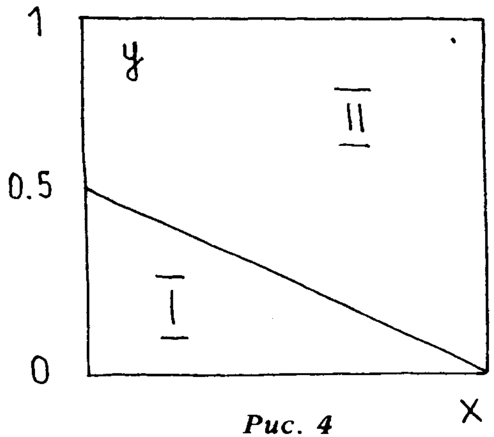


Рис. 4

Интересно сравнить это значение с аналогичным пределом в случае блуждания на этой же решетке без ограничения на самопересечения. Матрица, генерирующая простой случайный путь на квадратной решетке, используется при решении задачи Изинга /см., например, /8/ /. Удваивая матричные элементы, соответствующие проходу узла в вертикальном направлении и проводя стандартный анализ получающейся статсуммы, можно получить для ν выражение

$$\nu = \frac{3+\sqrt{17}}{2} = 3{,}5615\ldots \qquad /18/$$

Предел ν иногда называют средним числом возможных продолжений пути. Сравнение /17/ и /18/ показывает, как влияет условие отсутствия самопересечений на значение этого числа.

Несмотря на свою простоту, результат /17/ нетривиален хотя бы потому, что является первым точным численным результатом в задачах о случайных блужданиях без самопересечений.

В заключение я благодарю Я.М.Ковальского за полезные обсуждения.

Литература

1. *P.J.Flory, Principles of Polymer Chemistry, Cornell University Press, Ithaca, 1953.*
2. *H.N.V.Temperley. Phys.Rev., 103, 1, 1956.*
3. *М.Е.Фишер. Природа критического состояния. М., Мир, 1968.*
4. *Э.В.Монтролл. В сб. "Прикладная комбинаторная математика", М., Мир, 1968.*
5. *Э.В.Монтролл. В сб. "Устойчивость и фазовые переходы", М., Мир, 1973.*
6. *P.M.Kasteleyn. J.Math.Phys., 4, 287, 1963.*
7. *L.Onsager. Phys.Rev., 65, 117, 1944.*
8. *Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. "Статистическая физика", М., ФМ, 1963.*

Рукопись поступила в издательский отдел 23 марта 1976 года.