

ТЕРМОДИНАМИКА И ТОПОЛОГИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ: СТАТИСТИКА ДИАГРАММ СЛУЧАЙНЫХ УЗЛОВ НА КОНЕЧНЫХ РЕШЕТКАХ

О. А. Васильев^{a*}, С. К. Нечаев^{a,b**}

^a *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
117334, Москва, Россия*

^b *UMR 8626, CNRS-Université Paris XI, LPTMS, Université Paris Sud
91405, Orsay Cedex, France*

Поступила в редакцию 7 мая 2001 г.

Аналитическими и численными методами исследованы статистические свойства случайных решеточных узлов, топология которых определяется алгебраическими топологическими инвариантами Джонса–Кауффмана. Представление полиномиального инварианта Кауффмана случайной диаграммы узла в виде статсуммы модели Поттса со случайной конфигурацией ферро- и антиферромагнитных связей позволило изучить вероятность распределения случайных плотных узлов на плоской квадратной решетке по топологическим классам. Топологический класс характеризуется старшей степенью полиномиального инварианта Кауффмана и интерпретируется как свободная энергия q -компонентной спиновой системы Поттса при $q \rightarrow \infty$. Показано, что старшая степень инварианта Кауффмана узла коррелирует с минимальной энергией соответствующей спиновой системы Поттса. С помощью метода трансфер-матриц численно исследована вероятность распределения узлов по топологическим классам в зависимости от типов локальных пересечений и размера плоской диаграммы узла. Полученные результаты сопоставлены с вероятностью распределения минимальной энергии системы Поттса со случайными ферро- и антиферромагнитными связями.

PACS: 75.10.Nr, 02.40.Re, 05.50.+q

1. ВВЕДЕНИЕ

Новые интересные задачи появляются в настоящее время, как правило, на стыке традиционных областей. Это ярко демонстрирует статистическая физика макромолекул, которая возникла из взаимопроникновения физики твердого тела, статистической физики и биофизики. Другим примером новой области, формирующейся в настоящее время, является статистическая топология, родившаяся из слияния статистической физики, теории интегрируемых систем, алгебраической топологии и теории групп. К области статистической топологии относятся, с одной стороны, математические проблемы построения топологических инвариантов узлов и за-

цеплений на основе решений ряда интегрируемых моделей, а с другой стороны — физические задачи определения энтропии случайных узлов и зацеплений. В дальнейшем мы будем уделять внимание в основном именно этим вопросам, которые достаточно условно можно выделить в подобласть «вероятностно-топологических» задач [1]. Остановимся на этом круге вопросов несколько подробнее.

Рассмотрим решетку, вложенную в трехмерное пространство, и пусть Ω — ансамбль всех возможных замкнутых самонепересекающихся траекторий из N шагов с фиксированной точкой. Обозначим через ω некоторую конкретную реализацию траектории. Наша задача заключается в вычислении вероятности $P(\omega)$ того, что узел, образованный траекторией $\omega \in \Omega$, принадлежит некоторому заданному топологическому типу. Формально сказанное выше можно записать следующим образом:

*E-mail: vasilyev@itp.ac.ru

**E-mail: nechaev@litp.ac.ru

$$P\{\text{Inv}\} = \frac{1}{\mathcal{N}(\Omega)} \sum_{\{\omega \in \Omega\}} \delta\{\text{Inv}(\omega) - \text{Inv}\}, \quad (1)$$

где $\text{Inv}(\omega)$ — функциональное представление инварианта узла для траектории ω , а Inv — конкретный топологический инвариант, который характеризует интересующий нас топологический тип узла или зацепления, $\mathcal{N}(\Omega)$ — общее число траекторий, δ — дельта-функция. Вероятность должна удовлетворять условиям нормировки

$$\sum_{\{\text{Inv}\}} P\{\text{Inv}\} = 1.$$

Энтропией S узла заданного топологического типа назовем выражение

$$S\{\text{Inv}\} = \ln P\{\text{Inv}\}. \quad (2)$$

Опираясь на определения, приведенные выше, нетрудно заметить, что вероятностно-топологические задачи имеют сходство с задачами физики неупорядоченных систем и в некоторых случаях, как будет показано далее, с термодинамикой спин-стекольных систем. А именно, топологическое состояние играет роль «замороженного беспорядка»; усреднение функционала $P\{\text{Inv}\}$ осуществляется по флуктуациям траектории при фиксированном «замороженном топологическом состоянии» и аналогично вычислению статистической суммы спиновой системы с «замороженным беспорядком» в константе взаимодействия. В связи с отмеченной аналогией возникает вопрос, можно ли переносить на класс вероятностно-топологических задач понятия и методы, выработанные в процессе многолетних исследований неупорядоченных статистических систем: например, справедливо ли понятие самоусредняемости для энтропии узла?

Основным отличием систем с топологическим беспорядком от стандартных спиновых систем с беспорядком в константе взаимодействия, является сильная нелокальность: топологическое состояние определено лишь для всей замкнутой цепи, является «глобальным свойством» и плохо определено для любой подсистемы, т. е. говорить о топологии участка замкнутой цепи можно лишь весьма приблизительно. Тем не менее ниже мы рассматриваем решеточную модель, для которой существует однозначная связь топологического беспорядка с беспорядком в константе локального взаимодействия некоторой неупорядоченной системы спинов на решетке.

Как всегда, когда речь заходит о топологических задачах, возникает проблема классификации топологических состояний. Традиционный топологический инвариант — инвариант Гаусса — не подходит для наших целей, поскольку является абелевым (коммутативным) и учитывает лишь «кумулятивный эффект» от зацеплений, не принимая во внимание то, что топологическое состояние существенным образом зависит от последовательности, в которой формировалось зацепление. Например, при зацеплении некоторой «пробной» траектории за два или большее число препятствий, существуют конфигурации, зацепленные за несколько препятствий сразу, но не зацепленные за каждое препятствие в отдельности. В связи с этим становится ясно, что самые очевидные вопросы, касающиеся вычисления вероятности образования узла при случайном замыкании концов траектории, не могут быть решены при помощи инварианта Гаусса из-за его неполноты.

Предложенный в 1928 г. полиномиальный инвариант Александера оказался весьма полезным для классификации узлов. Прорыв в этой области был сделан в 1975–1976 гг. в работах [2], в которых было предложено использовать полиномиальные инварианты Александера для классификации топологического состояния замкнутых случайных траекторий, генерированных на компьютере методом Монте-Карло. После этих работ стало ясно, что полиномы Александера, являясь несравненно более сильными инвариантами, чем интеграл Гаусса, могут служить удобным средством при численном исследовании термодинамических характеристик случайных блужданий с топологическими ограничениями. Статистико-топологический подход, развитый в [2], оказался весьма плодотворным, и основные известные в настоящее время результаты получены в основном с помощью этого метода и его последующих модификаций.

В 1984 г. Джонс предложил другой полиномиальный инвариант узлов и зацеплений [3, 4]. Этот инвариант был определен при исследовании топологических свойств кос [5, 6]. Джонсу удалось обнаружить глубокую связь между соотношениями группы кос и уравнениями Янга–Бакстера, являющимися необходимым условием коммутативности трансфер-матрицы [7]. Отметим, что инварианты Александера, Джонса, HOMFLY и их различные обобщения [8] не являются полными, что, однако, не мешает их успешному использованию при решении статистических задач. Работы Кауффмана позволили наполнить определение инвариантов Александера и Джонса наглядным геометрическим смыслом. В

частности, было показано, что инварианты Джонса связаны со статсуммой спиновой модели Поттса [9], а инварианты Александра могут быть представлены статсуммой модели свободных фермионов [10].

В данной работе, используя аналогию между полиномиальным инвариантом Джонса–Кауффмана и статсуммой модели Поттса с ферро-(ф-) и антиферромагнитными (а-) связями [11, 12], мы исследовали статистические свойства узлов. В частности, метод трансфер-матриц, развитый в работах [13–15], позволил нам определить вероятность $P\{f_K\}$, найти случайно генерированный узел K в специфическом топологическом состоянии, характеризуемым инвариантом f_K .

Вкратце идея оценки $P\{f_K\}$ заключается в следующем.

1. Топологический инвариант Джонса–Кауффмана представляется в виде статсуммы модели Поттса с беспорядком в константе взаимодействия;
2. Вычисление термодинамических характеристик ансамбля узлов осуществляется с помощью метода трансфер-матриц для спиновых систем.

Структура работы такова. В разд. 2 описана рассматриваемая модель, дано определение полиномиального инварианта Джонса–Кауффмана и показана его связь со статсуммой модели Поттса. Изложение используемых численных методов и необходимые вспомогательные конструкции содержатся в разд. 3. В разд. 4 обсуждаются результаты численного моделирования и делаются выводы.

2. РЕШЕТОЧНЫЕ УЗЛЫ: МОДЕЛЬ И НЕОБХОДИМЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим множество случайно генерированных плотных узлов¹⁾ на решетке в трехмерном пространстве. Узел назовем «плотным», если нить, образующая узел, плотно заполняет решетку и не имеет возможности флуктуировать в пространстве. В этом случае конфигурационная энтропия узлов разных топологических типов отсутствует и вероятность образования узла заданного топологического типа определяется исключительно локальной топологией системы.

Рассматриваемая модель, разумеется, является предельно упрощенной, так как не учитывает флуктуационные степени свободы решеточного узла. Тем

¹⁾ Далее мы будем говорить лишь об узлах, имея в виду как узлы, так и зацепления. Там, где необходимо, мы будем отдельно отмечать разницу между узлами и зацеплениями.

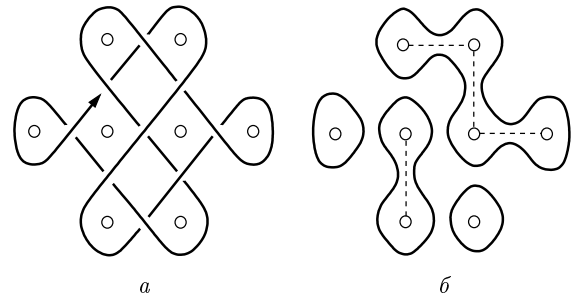


Рис. 1. Решеточная диаграмма узла $N = 3 \times 3$ (а) и ее разрезание (б). Кружками показано положение спинов модели Поттса, штриховой линией — граф на решетке Поттса

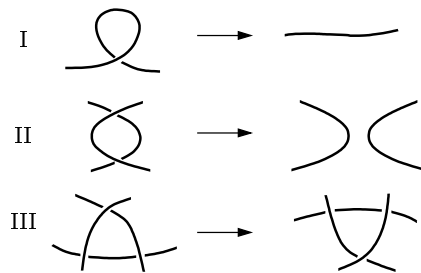


Рис. 2. Движения Радемайстера I, II и III

не менее она отвечает физической ситуации, имеющей место в статистической физике конденсированного (глобулярного) состояния полимерных молекул. Практически все существующие на сегодняшний день модели, которые принимают во внимание топологические ограничения на набор допустимых конформаций полимерных цепей в пространстве, предполагают малую плотность полимера, т. е. описывают ситуацию вдали от компактного глобулярного состояния. В работах [16] была высказана гипотеза о принципиально новой глобулярной фазе кольцевой незаузленной макромолекулы, названной «складчатой глобулой», существующей при большой плотности полимера, т. е. в области «плотных узлов». Несмотря на наличие косвенных экспериментов, говорящих в пользу гипотезы «складчатой глобулы» [17], ее непосредственное наблюдение в реальных или компьютерных экспериментах сталкивается с серьезными техническими трудностями. В связи с этим изучение распределения случайно генерированных плотных узлов по различным топологическим типам может существенно помочь в понимании структуры фазового пространства заузленных полимеров в глобулярной фазе.

Конфигурация нити в трехмерном пространстве не очень удобна для определения топологического типа узла. Стандартный прием заключается в следующем: спроектируем узел на плоскость в общем положении, т. е. так, чтобы в каждой точке плоскости пересекались не более чем два участка узла и для каждой точки пересечения определим, какая линия проходит сверху («проход»), а какая — снизу («переход»), согласно пространственной топологии узла. Такую проекцию, оснащенную проходами и переходами, назовем диаграммой узла. Далее мы будем работать исключительно со статистикой диаграмм узлов. Разумеется, это вносит дополнительное упрощение в исследуемую модель, однако мы полагаем, что в рассматриваемой фазе плотных узлов данное ограничение не очень существенно, поскольку, как было сказано выше, вклад в энтропию узла от флуктуаций нити отсутствует.

Итак, рассмотрим квадратную решетку размера $N = L \times L$ на плоскости, повернутую для удобства на угол $\pi/4$. Заполним решетку (плотно) траекторией, имеющей пересечения в каждой вершине, явно указав при этом, какая нить проходит сверху, а какая — снизу (пример решетки 3×3 показан на рис. 1а). Нетрудно проверить, что если L нечетно, то траектория, плотно покрывающая решетку, единственна, т. е. представляет собой узел, топология которого однозначно определяется проходами, переходами и граничными условиями. Тем самым вероятность реализации узла заданного топологического типа задается распределением проходов и переходов в каждой вершине решетки. Задача, рассматриваемая в данной работе, заключается в исследовании распределения плотных узлов по топологическим классам для разных типов распределений проходов и переходов.

2.1. Движения Радемайстера и определение инварианта Кауффмана

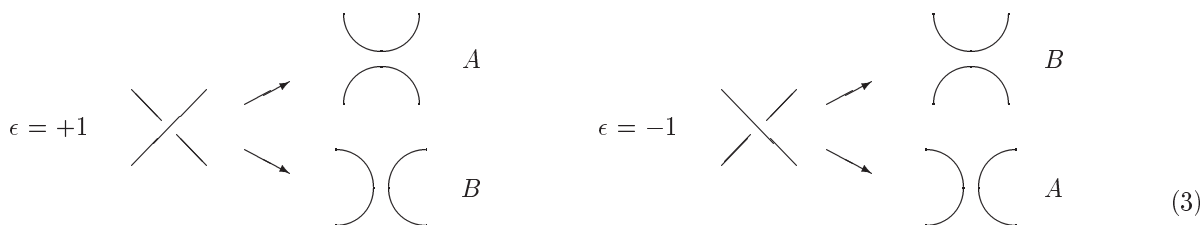
В любой топологической задаче основной проблемой является сравнение узлов. Для диаграммы узла

на плоскости справедлива следующая теорема Радемайстера [18]: *Два узла в трехмерном пространстве могут быть непрерывным образом деформированы один в другой тогда и только тогда, когда диаграмма одного узла может быть трансформирована в диаграмму другого узла с помощью последовательности локальных преобразований I, II и III, изображенных на рис. 2.*

Как видно из рис. 2, движение Радемайстера I ведет к образованию сингулярности на плоскости при непрерывном стягивании петли, и данное движение является запрещенным для гладких траекторий на плоскости. Два узла называются регулярно-изотопическими, если их плоские диаграммы могут быть преобразованы одна в другую при помощи движений Радемайстера II и III. Если для преобразования диаграмм требуется использование всех трех движений Радемайстера, то такие узлы называются просто изотопическими. В трехмерном пространстве все узлы и зацепления являются изотопическими.

Рассмотрим двумерную диаграмму узла как некий граф, у которого для каждой точки пересечения определено, какая линия проходит сверху, а какая снизу. Таким образом, каждой вершине графа соответствует один из двух типов пересечений. Сопоставим k -ой вершине графа переменную ϵ_k , которая принимает значения ± 1 в зависимости от типа пересечения в вершине.

Определим алгебраический инвариант Кауффмана как сумму по всем способам разрезания диаграммы в вершинах. А именно, мы приписываем каждому разрезанию статистические веса по следующим правилам: для вершины с $\epsilon = +1$ вес A отвечает горизонтальному, а вес B — вертикальному разрезаниям; для вершины с $\epsilon = -1$ вес B отвечает горизонтальному, а вес A — вертикальному разрезаниям, как показано ниже:



Таким образом, для диаграммы узла с N вершинами существует 2^N различных микросостояний, каждое из которых задается определением горизонтального или вертикального разрезания в каждой из N вершин. Каждому микросостоянию ω диаграммы узла соответствует набор непересекающихся и самонепересекающихся циклов. Совокупность всех микросостояний обозначим $\{\omega\}$ (в дальнейшем мы будем использовать фигурные скобки $\{\dots\}$ для обозначения суммирования по состояниям).

Пусть $S(\omega)$ — число циклов для микросостояния ω . Рассмотрим статистическую сумму

$$f_{KR} = \sum_{\{\omega\}} d^{S(\omega)-1} A^{l(\omega)} B^{N-l(\omega)}, \quad (4)$$

где суммирование проводится по всем возможным 2^N разрезаниям диаграммы, а $l(\omega)$ и $N - l(\omega)$ — числа вершин с весами A и B соответственно для заданного набора разрезаний микросостояния ω .

Кауффману принадлежит следующее утверждение [9]. Полином f_{KR} от переменных A, B и d , представленный статсуммой (4), есть топологический инвариант регулярно изотопических узлов тогда и только тогда, когда между параметрами A, B и d выполняются следующие соотношения:

$$AB = 1, \quad ABd + A^2 + B^2 = 0.$$

Доказательство этого утверждения [9] основано на проверке инвариантности статсуммы f_{KR} по отношению к движениям Радемайстера II, III. (Инвариант для всех трех движений Радемайстера будет определен позднее.) Данные соотношения накладывают следующие ограничения на параметры A, B и d в (4):

$$\begin{aligned} B &= A^{-1}, \\ d &= -A^2 - A^{-2}, \end{aligned} \quad (5)$$

т. е. инвариант (4) является полиномом одной переменной A .

2.2. Статсумма модели Поттса как бихроматический полином

Рассмотрим произвольный плоский граф с N вершинами. Сопоставим каждой вершине i спиновую переменную σ_i ($1 \leq \sigma_i \leq q$). Припишем ребру графа, связывающему i -ый и j -ый спины ($1 \leq \{i, j\} \leq N$) константу связи $J_{i,j}$. Определим энергию модели Поттса [7]

$$E = - \sum_{\{i,j\}} J_{i,j} \delta(\sigma_i, \sigma_j),$$

где суммирование $\{i, j\}$ проводится только по соседним, т. е. связанным ребром графа спинам. Тогда для статистической суммы получаем

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left(\sum_{\{i,j\}} \frac{J_{i,j}}{T} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \right),$$

где $\{\sigma\}$ обозначает суммирование по всем возможным спиновым состояниям, а сумма $\{i, j\}$ определена выше. Это выражение можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\{i,j\}} (1 + v_{i,j} \delta(\sigma_i, \sigma_j)), \\ v_{i,j} &= \exp \left(\frac{J_{i,j}}{T} \right) - 1. \end{aligned} \quad (6)$$

Пара соседних спинов σ_i и σ_j вносит в множитель вклад равный $\exp(J_{i,j}/T)$, если $\sigma_i = \sigma_j$, и вклад 1, если $\sigma_i \neq \sigma_j$. Применим для заданной спиновой конфигурации и соответствующего ей графа следующие правила:

- 1) если для некоторого ребра, связывающего две вершины, вклад в произведение двух спинов, находящихся в этих вершинах, равен 1, то мы удаляем данное ребро из графа;
- 2) если вклад от спинов σ_i и σ_j , соответствующих данному ребру, равен $\exp(J_{i,j}/T)$, то мы оставляем ребро в графе.

После применения этой процедуры мы получаем взаимно однозначное соответствие между спиновой конфигурацией, отвечающей слагаемому в сумме (6), и набором компонент графа.

Рассмотрим граф G , содержащий M ребер и C связанных компонент, причем изолированную вершину мы рассматриваем как отдельную компоненту. В результате суммирования по всем возможным спиновым конфигурациям и всем соответствующим им разбиениям графа G , мы можем переписать статсумму (6) в виде

$$Z = \sum_{\{G\}} q^C \prod_{\{i,j\}}^M v_{i,j}, \quad (7)$$

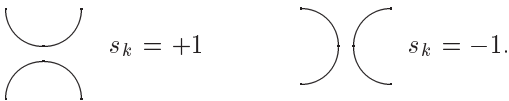
где $\{G\}$ обозначает суммирование по всем графам, а $\prod_{\{i,j\}}^M$ обозначает произведение по всем ребрам данного графа G . Отметим, что выражение (7) можно рассматривать как аналитическое продолжение системы спинов Поттса на нецелые и даже комплексные значения q .

При $v_{i,j} \equiv v$ выражение (7) совпадает с хорошо известным представлением статсуммы модели Поттса в виде бихроматического полинома (см., например, [7, 19]). Это же выражение фигурирует в соответствии модели Поттса и модели коррелированной перколяции по узлам и связям, предложенным Фортуином и Кастеляйном [20], которое лежит в основах кластерных Монте-Карло алгоритмов Свенедсена–Ванга [21] и Вольфа [22] для модели Поттса.

2.3. Представление инварианта Кауффмана в виде статсуммы модели Поттса

Инвариант Кауффмана узла можно представить в виде статсуммы модели Поттса на графе, соответствующем произвольной плоской диаграмме данного узла, однако в дальнейшем мы ограничимся исследованием лишь решеточных узлов.

Перепишем инвариант Кауффмана в виде статсуммы модели Поттса, определенной в предыдущем разделе. Обозначим M решеточную диаграмму узла (см. рис. 1а). Введем вспомогательные переменные $s_k = \pm 1$, задающие тип разрезания в каждой вершине k решетки независимо от переменных $\epsilon_k = \pm 1$ в тех же вершинах:



Пусть $\omega = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ — набор всех переменных, характеризующих разрезание решетки, где N — общее число пересечений в решетке. В результате инвариант Кауффмана (4) можно записать в виде

$$f_{KR}(\epsilon_1, \dots, \epsilon_N) = \sum_{\{\omega\}} (-A^2 - A^{-2})^{S(\omega)-1} \times \exp \left(\ln A \sum_{i=1}^N \epsilon_k s_k \right). \quad (8)$$

Здесь $\{\omega\}$ обозначает суммирование по всем значениям переменных s_k , что соответствует суммированию по всем разрезаниям решетки M , а переменные ϵ_k характеризуют замороженный беспорядок системы. Покажем, что конфигурации, полученные разрезаниями, находятся во взаимнооднозначном соответствии со спиновыми конфигурациями модели Поттса на дуальной решетке.

Рассмотрим решетку модели Поттса Λ , соответствующую решетке M (см. рис. 1б). На рис. 1 кружками отмечено положение спинов Поттса. Ребро $b_{i,j}$

решетки Λ соответствует вершине k решетки M , поэтому беспорядок в вершинах M , заданный переменными ϵ_k , совпадает с беспорядком на ребрах Λ , обозначаемый $b_{i,j}$, т. е. с беспорядком в константах взаимодействия. Определим беспорядок $b_{i,j}$ решетки Λ через константы взаимодействия в соответствующей вершине k решетки M

$$b_{i,j} = \begin{cases} -\epsilon_k, & \text{ребро } (i, j) \text{ вертикально,} \\ \epsilon_k, & \text{ребро } (i, j) \text{ горизонтально.} \end{cases} \quad (9)$$

Напомним, что определение инварианта Кауффмана (4) связано с разрезанием решетки M на полигоны — систему замкнутых плотно упакованных непересекающихся контуров (см. рис. 1б). Для данной конфигурации разрезов на M и соответствующей дуальной решетки Λ примем следующее соглашение: отметим все ребра решетки Λ , если эти ребра не пересекаются полигонами решетки M . На рис. 1б отмеченные ребра обозначены штриховой линией. Остальные ребра решетки Λ оставим неотмеченными и перепишем статсумму $\sum s_k \epsilon_k$ в уравнении (8) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sum_k s_k \epsilon_k &= \sum_{\text{отм}} s_k \epsilon_k + \sum_{\text{неотм}} s_k \epsilon_k = \\ &= \sum_{\text{отм}}^{\text{гор}} s_k \epsilon_k + \sum_{\text{отм}}^{\text{вер}} s_k \epsilon_k + \sum_{\text{неотм}}^{\text{гор}} s_k \epsilon_k + \sum_{\text{неотм}}^{\text{вер}} s_k \epsilon_k = \\ &= \sum_{\text{отм}} b_{i,j} + \sum_{\text{отм}} b_{i,j} - \sum_{\text{неотм}} b_{i,j} - \sum_{\text{неотм}} b_{i,j} = \\ &= - \sum_{\text{все ребра}} b_{i,j} + 2 \sum_{\text{отм}} b_{i,j}, \end{aligned} \quad (10)$$

где мы использовали соотношение

$$\sum_{\text{отм}} b_{i,j} + \sum_{\text{неотм}} b_{i,j} = \sum_{\text{все ребра}} b_{i,j}.$$

Пусть m_ω — число отмеченных ребер и C_ω — число связанных компонент отмеченного графа ω с N_p вершинами (каждая вершина соответствует спину Поттса). Соотношение Эйлера для графа имеет вид

$$S(\omega) = 2C_\omega + m_\omega - N_p.$$

Теперь легко трансформировать уравнение (8) в следующее

$$\begin{aligned} f_{KR}(A, \{b_{i,j}\}) &= (-A^2 - A^{-2})^{-(N_p+1)} \times \\ &\times \prod_{\text{все ребра}}^N (A^{-b_{i,j}}) \sum_{\{G\}} (-A^2 - A^{-2})^{2C_\omega} \times \\ &\times \prod_{\text{отм}}^{m_\omega} (A^{2b_{k,l}} (-A^2 - A^{-2})), \end{aligned} \quad (11)$$

где мы использовали соотношения (10) и тот факт, что N нечетно. Сравнивая (11) с (6), получаем равенство

$$\sum_{\{G\}} (A^2 + A^{-2})^{2C_\omega} \prod_{\text{отм}}^{m_\omega} (A^{2b_{i,j}} (-A^2 - A^{-2})) \equiv \sum_{\sigma} \prod_{\{i,j\}} (1 + v_{i,j} \delta(\sigma_i, \sigma_j)), \quad (12)$$

в котором правая часть совпадает со статсуммой модели Поттса, представленной в виде бихроматического полинома. Таким образом,

$$v_{i,j} = A^{2b_{i,j}} (-A^2 - A^{-2}) = -1 - A^{4b_{i,j}}, \\ q = (A^2 + A^{-2})^2.$$

Так как константы беспорядка могут принимать только дискретные значения $b_{i,j} = \pm 1$, мы имеем следующее выражение для констант взаимодействия $J_{i,j}$:

$$J_{i,j} = T \ln (1 - (A^2 + A^{-2}) A^{2b_{i,j}}) = T \ln (-A^{4b_{i,j}}). \quad (13)$$

Таким образом, мы приходим к следующему утверждению. Топологический инвариант Кауффмана $f_{KR}(A)$ регулярно изотопических узлов на M можно записать в форме статсуммы двумерной модели Поттса на соответствующей решетке Λ :

$$f_{KR}(A, \{b_{i,j}\}) = K(A, \{b_{i,j}\}) Z(q(A), \{J_{i,j}(b_{i,j}, A)\}), \quad (14)$$

где

$$K(A, \{b_{i,j}\}) = (A^2 + A^{-2})^{-(N_p+1)} \times \exp \left(-\ln A \sum_{\{i,j\}} b_{i,j} \right) \quad (15)$$

есть тривиальный множитель, не зависящий от поттсовских спинов. Статсумма модели Поттса имеет вид

$$Z(q(A), \{J_{i,j}(b_{i,j}, A)\}) = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left(\sum_{\{i,j\}} \frac{J_{i,j}(b_{i,j}, A)}{T} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \right), \quad (16)$$

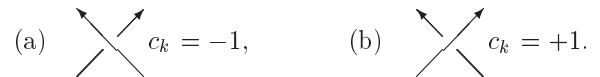
где константа взаимодействия $J_{i,j}$ и число состояний q выражаются следующим образом:

$$\frac{J_{i,j}}{T} = \ln(-A^{4b_{i,j}}), \quad q = (A^2 + A^{-2})^2, \quad (17)$$

а переменная $b_{i,j}$ играет роль беспорядка на ребрах решетки Λ , соответствующей решетке M . Соотношение между $b_{i,j}$ и ϵ_k задается выражением (9).

Специфической особенностью статсуммы (16) является связь между температурой T и числом состояний спина q , из-за которой T и q нельзя рассматривать как независимые переменные. Если мы фиксируем положительное значение q , то, согласно формулам (17), переменная A может формально принимать комплексные значения, а аргументом логарифма может являться комплексное число. Появление комплексных чисел в статсумме можно понимать двояко. С одной стороны, это расширение области определения статсуммы на комплексную плоскость. С другой стороны, сами параметры T и $J_{i,j}$ в выражение для инварианта Кауффмана не входят, и их комплексные значения не требуют специальной интерпретации. Далее мы будем интересоваться в основном вероятностью распределения старшей степени полиномиального инварианта и можем отвлечься от смысла конкретных значений переменных A , T , и $J_{i,j}$.

Итак, мы определили инвариант регулярно изотопических узлов f_{KR} , диаграммы которых инвариантны к движениям Радемайстера II и III. Чтобы получить инвариант изотопических узлов f_{KI} с ориентированной диаграммой, статсумма f_{KI} должна быть инвариантна относительно всех движений Радемайстера. Для каждого ориентированного пересечения введем переменную $c_k = \pm 1$ согласно правилу



Кручение узла $Tw(\omega)$ определим как сумму переменных c_k по всем пересечениям:

$$Tw(\omega) = \sum_k c_k.$$

Инварианты изотопических узлов $f_{KI}(\omega)$ выражаются следующим образом [9]:

$$f_{KI}(\omega) = f_{KR}(\omega) (-A)^{3Tw(\omega)}. \quad (18)$$

Заметим, что для наших граничных условий $c_k = b_k$. Известно, что полиномиальный инвариант Кауффмана изотопических узлов $f_{KI}(\omega; A)$ от переменной A эквивалентен полиномиальному инварианту Джонса $f_J(\omega; x)$ от переменной $x = A^4$. Теперь, пользуясь формулами (14) и (15), мы можем выразить инвариант Джонса через статсумму модели Поттса. Пусть

$$Z(t; q) = \sum_E H_E(E, q) t^{-E}$$

— статсумма модели Поттса, где $t = e^\beta$, E — уровни энергии, по которым происходит суммирование, $H(E, q)$ — кратность вырождения уровня энергии E для данного значения q . Тогда, учитывая, что

$$x = A^4 = -t,$$

из формул (14), (15) и (18) мы получаем выражение для полиномиального инварианта Джонса:

$$f_J = \sum_E H(E; q = 2 + x + x^{-1})(-x)^{-E} \times \\ \times (1+x)^{-N_p-1} (-\sqrt{x})^{N_p+1 + \sum_{\{i,j\}} b_{i,j}}. \quad (19)$$

В дальнейшем, говоря о максимальной степени полиномиального инварианта, мы будем иметь в виду максимальную степень переменной x в полиномиальном инварианте Джонса f_J . При этом будем помнить, что степень полиномиального инварианта Кауффмана изотопических узлов f_{KI} получается из соответствующей степени полиномиального инварианта Джонса умножением на 4.

Как было сказано выше, наша проблема заключается в вычислении вероятности $P\{f_J\}$ того, что среди всех 2^N возможных реализаций беспорядка $\{\epsilon_k\}$, $k = 1, \dots, N$, найдется решеточный узел в топологическом состоянии с заданным инвариантом Кауффмана $f_J(x, \{\epsilon_k\})$. Эта вероятность формально может быть записана в виде

$$P_N\{f_J\} = \frac{1}{2^N} \sum_{\{\epsilon_k\}} \delta(f_J(x, \{\epsilon_1, \dots, \epsilon_N\}) - f_J).$$

Таким образом, топологический беспорядок, определенный случайным независимым выбором пересечений типа $\epsilon = +1$ и $\epsilon = -1$, является случайным замороженным внешним полем.

При использовании инварианта Джонса каждый топологический класс («гомотопический тип») характеризуется полиномом. В этом случае для точной идентификации гомотопического типа узла на решетке с N пересечениями потребуется порядка N переменных. Число разных гомотопических типов растет по порядку величины как 2^N , в связи с чем изучать вероятность каждого отдельного гомотопического типа, характеризуемого N переменными, очень трудно. Поэтому мы рассмотрим упрощенную характеристику решеточного узла — старшую степень n его полиномиального инварианта $f_J(x)$:

$$n = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\ln f_J(x)}{\ln x}. \quad (20)$$

Для тривиального узла $n = 0$ и по мере увеличения сложности узла старшая степень растет (не превосходя значения $n = N$). Таким образом, все множество решеточных узлов мы разбиваем на подклассы, каждый из которых характеризуется степенью n ($0 \leq n \leq N$) полиномиального инварианта Джонса. Мы будем изучать вероятность $P(n)$ того, что случайный узел принадлежит к одному из этих подклассов, т. е. характеризуется степенью n инварианта Джонса.

Генерировать случайные узлы можно двумя способами.

1. Мы можем расположить на диаграмме узла с N вершинами фиксированное число пересечений типа $\epsilon = -1$. Остальные вершины, соответственно, будут пересечением типа $\epsilon = +1$.

2. Мы можем в каждой вершине диаграммы с вероятностью p поместить пересечение типа $\epsilon = -1$ и с вероятностью $1 - p$ — пересечение типа $\epsilon = +1$.

Нетрудно заметить, что тривиальному узлу, на диаграмме которого все пересечения имеют тип $\epsilon = +1$, соответствует статсумма с ферро-(ф-) и антиферромагнитными (а-) связями, распределенными согласно правилу (9). Примесью (соответствующей $\epsilon_k = -1$ на диаграмме узла) будем считать смену знака $b_{i,j}$ относительно значений, соответствующих тривиальному узлу. Следует различать понятие «примесь» — смену знака $b_{i,j}$, от а-связи $b_{i,j} = -1$. Для тривиального узла, для которого все $\epsilon_k = 1$, примесей на решетке нет, а а-связи есть.

3. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ ПОСТРОЕНИЯ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

3.1. Вид решетки для модели Поттса и положение ферро- и антиферромагнитных связей

Опишем геометрию решетки модели Поттса, которая соответствует диаграмме узла размером $N = L \times L$. В данной работе мы ограничиваемся рассмотрением только квадратных решеток, хотя все рассуждения остаются верными и для прямоугольных решеток. На рис. 3а приведен пример тривиального решеточного узла размером $N = 5 \times 5$. Положение спинов Поттса, соответствующих данной решеточной диаграмме, показано кружками. Решетка спинов Поттса, соответствующая этому узлу, изображена на рис. 3б. На рис. 3б ф-связи (которые на рис. 1 были бы горизонтальными) показаны сплошной линией, а-связи (которые на рис. 1 были бы вертикальными) показаны штриховой линией. На

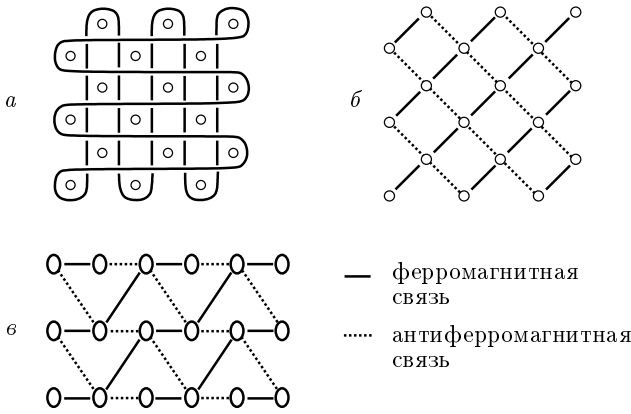


Рис. 3. Узел размером $N = 5 \times 5$ (а). Конфигурация спинов Поттса, соответствующая узлу $N = 5 \times 5$ (б) и такая же конфигурация, приведенная к прямоугольной решетке $L_h \times L_v = 3 \times 6$ (б)

рис. 3в та же самая решетка приведена к прямоугольной решетке вида $L_h \times L_v$, где $L_h = L + 1$, $L_v = (L + 1)/2$, в данном случае $L_v = 3$, $L_h = 6$. Статсумма модели Поттса будет исследоваться на прямоугольной решетке такого вида.

То, что высота решетки модели Поттса в два раза меньше высоты решеточной диаграммы узла (см. рис. 3а–в) особенно удобно при использовании метода трансфер-матриц, когда вычислительные затраты экспоненциально зависят от высоты решетки.

$$N_+ = \sum_{\{i,j\}} \delta(b_{i,j}, 1)$$

— число ф-связей на решетке,

$$N_- = \sum_{\{i,j\}} \delta(b_{i,j}, -1)$$

— число а-связей на решетке. Примеси, которой соответствует $\epsilon_k = -1$ на исходной решетке, отвечает изменение знака соответствующей константы $b_{i,j}$ на решетке модели Поттса.

Еще раз обратим внимание на то, что «примесью» мы называем именно изменение типа пересечения с $\epsilon_k = +1$ на $\epsilon_k = -1$, которому отвечает смена знака константы связи $b_{i,j}$, соответствующей данному пересечению, а не а-связь (такие связи присутствуют на решетке Поттса тривиального узла). Тривиальный узел характеризуется отсутствием примесей на решетке модели Поттса:

$$N_+ = \frac{N+1}{2}, \quad N_- = \frac{N-1}{2}.$$

Заметим, что инварианты Кауффмана для узла и его зеркального образа различаются. Это является следствием следующего свойства инварианта Джонса–Кауффмана: инвариант зеркального образа узла получается заменой $t \rightarrow t^{-1}$ (и $A \rightarrow A^{-1}$), в результате распределение степеней полинома становится несимметричным относительно замены $p \rightarrow 1 - p$.

3.2. Метод трансфер-матриц

Напомним, что нас интересует вероятность распределения старшей степени n инварианта Джонса–Кауффмана, усредненной по различным типам пересечений в диаграмме узла. Из определения (20) следует, что коэффициент перед членом со старшей степенью n , стоящий в полиноме Джонса случайно генерированного узла, не играет роли. Фиксируем некоторое число n_0 , генерируем ансамбль случайных диаграмм узлов и определим долю узлов со старшей степенью $n = n_0$.

Использование традиционного подхода к численному анализу q -компонентной спиновой системы Поттса предполагает, что каждому возможному состоянию столбца из L_v спинов соответствует собственный вектор трансфер-матрицы размера q^{L_v} . При использовании компьютеров типа Р-II-300 при разумном времени вычисления максимальный размер трансфер-матрицы составляет около 100–200. Это соответствует ширине полоски спинов $L_v = 8$ для $q = 2$ и $L_v = 4$ для $q = 3$. Очевидно, что для исследования модели Поттса при больших значениях q этот метод использовать практически невозможно.

Метод трансфер-матриц для произвольного q был предложен в работе [13]. Основная идея этого метода заключается в том, что каждому собственному вектору соответствует разбиение столбца на кластеры «связанных» спинов. Спины в каждом кластере по определению сонаправлены, поэтому число «цветов» q можно считать просто параметром, принимающим любые значения, в том числе нецелые и даже комплексные. Описание данного метода можно также найти в работах [14, 15], в которых он использовался для исследования модели Поттса с примесями на связях и определения нулей статсуммы антиферромагнитной модели Поттса в комплексной плоскости.

Ниже кратко изложены принципы определения базиса в пространстве «связанных» спинов, а также построения трансфер-матриц в этом базисе. В данном описании мы следуем работе [15].

Набору базисных векторов соответствует набор всевозможных разбиений столбца спинов на класте-

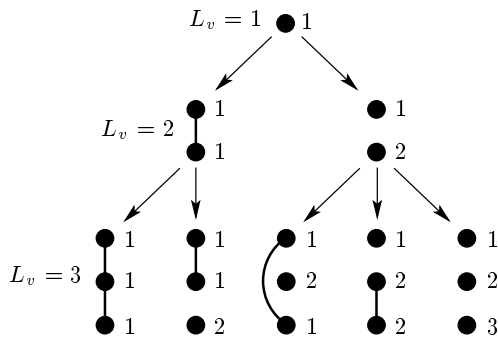


Рис. 4. Пошаговая генерация разбиений на кластеры столбца узлов, соответствующих векторам состояний

ры связанных спинов. При этом необходимо учитывать, что данное разбиение должно допускать реализацию в виде планарного графа в полуплоскости. Опишем рекурсивную процедуру определения базиса. Пусть у нас уже есть базис для столбца высотой L_v . Мы добавляем снизу еще один спин и получаем столбец высотой \tilde{L}_v . После этого мы берем, например, разбиение $v_1(L_v)$, соответствующее первому базисному вектору L_v и начинаем генерировать разбиения, соответствующие базисным векторам для столбца \tilde{L}_v , присоединяя добавленный спин к существующим в $v_1(L_v)$. При этом мы проверяем на каждом шаге, можно ли осуществить присоединение в рамках планарного графа в полуплоскости. После того как мы попытались присоединить добавленный спин ко всем существующим кластерам, мы генерируем разбиение, в котором добавленный кластер отдельный. После этого мы берем следующее разбиение для столбца L_v , например, $v_2(L_v)$, и повторяем процедуру генерации.

Мы начинаем процедуру с одного единственного спина, как показано на рис. 4. Приписываем ему цифру 1, как принадлежащему первому кластеру. Добавляем снизу еще один спин. Соответственно, для полоски из двух спинов имеем два состояния: $v_1(L_v = 2)$, когда два спина связаны и оба принадлежат кластеру 1, и $v_2(L_v = 2)$, когда спины не связаны и принадлежат соответственно кластерам 1 и 2, как показано на рис. 4. Базис для полоски из трех спинов мы получаем, присоединяя снизу еще один спин и связывая его со всеми кластерами. Кластеры нумеруются натуральными числами сверху вниз, а базисные векторы нумеруются в порядке генерации. Легко заметить, что при такой процедуре первый базисный вектор соответствует состоянию, когда все спины связаны друг с другом и принадлежат одному

кластеру, а последний базисный вектор соответствует состоянию, когда все спины отдельные и число кластеров равняется числу спинов в столбце. Общее число базисных векторов для полоски шириной m определяется числом Каталана

$$C_m = \frac{1}{m+1} \binom{2m}{m}$$

с соответствующим порядковым номером (см. [15]).

Обозначим $v_i(\setminus k)$ разбиение, полученное выделением из разбиения v_i спина с номером k в отдельный кластер, а $v_i(\{k, l\})$ — разбиение, в котором кластеры, которым принадлежат спины k и l , объединены в один.

Следуя методу, изложенному в [15], определим матрицу

$$D_{i,j}(k) = \delta(v_j(\setminus k), v_i) + q\delta(v_j(\setminus k), v_j).$$

Иными словами, элемент матрицы $D_{i,j}(k)$ отличен от нуля, когда в разбиении v_i спин с номером k не связан ни с какими другими. Если же этот спин не связан ни с какими другими и в разбиении j , то элемент матрицы равен q , иначе он равен 1.

Определим также матрицу $C(k, l)$,

$$C_{i,j}(k, l) = \delta(v_j(\{k, l\}), v_i),$$

элемент которой равен 1 тогда и только тогда, когда разбиение v_i получается из разбиения v_j объединением кластеров, которым принадлежат спины k, l .

Рассмотрим структуру решетки, первые две строчки которой показаны на рис. 5г (четное значение индекса $j + 1$ во втором столбце) и рис. 5д (нечетное значение индекса $j + 1$ во втором столбце). Столбцы спинов пронумерованы индексом j : $1 \leq j \leq L_h$, а положение спинов в столбце — индексом i : $1 \leq i \leq L_v$.

Из построения следует, что в трансфер-матрицах $T^{even}(j + 1 = 2k)$, соответствующих добавлению четного столбца $j + 1 = 2k$ после нечетного $j = 2k - 1$ (мы добавляем столбцы справа), присутствуют связи между спинами $\sigma_{i,j=2k-1}$ и $\sigma_{i+1,j=2k}$, а в трансфер-матрицах $T^{odd}(2j + 1)$, соответствующих добавлению нечетного столбца $j + 1 = 2k + 1$ после четного $j = 2k$, присутствуют связи между спинами $\sigma_{i,j=2k}$ и $\sigma_{i-1,j+1=2k+1}$.

Пусть

$$t = \exp(\beta J)$$

— вклад в статистический вес, соответствующий ф-связи $b(\sigma_{i,j}, \sigma_{i',j'}) = 1$, тогда а-примеси $b(\sigma_{i,j}, \sigma_{i',j'}) = -1$ соответствует вес

$$t^{-1} = \exp(-\beta J),$$

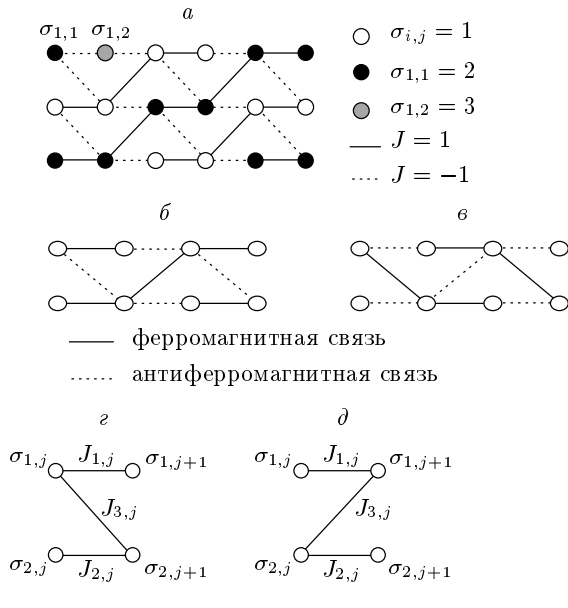


Рис. 5. Пример конфигурации связей, для которой минимальная энергия модели Поттса недостижима при $q = 2$ (а). Расположение ф- и а-связей на решетке Поттса $N = 3 \times 3$ для концентрации примесей $p = 0$ (б) и $p = 1$ (в). Расположение связей между столбцами с четными и нечетными номерами (z, d)

где $\beta = 1/T$. Таким образом, общий вклад конфигурации в статистический вес системы есть $t^{b(\sigma_{i,j}, \sigma_{i',j'})}$. Определим матрицу

$$P(i, j) = I(t^{b(\sigma_{i,j}, \sigma_{i,j+1})} - 1) + D(i, j)$$

для горизонтальной связи $(\sigma_{i,j}, \sigma_{i,j+1})$, а также матрицы для «косых» связей

$$R^{even}(i, j) = I + C(i, j)(t^{b(\sigma_{i,j}, \sigma_{i+1,j+1})} - 1),$$

$$R^{odd}(i, j) = I + C(i, j)(t^{b(\sigma_{i,j}, \sigma_{i-1,j+1})} - 1),$$

где I — единичная матрица.

Тогда мы получаем для трансфер-матриц следующие выражения:

$$T^{even}(j) = P(L_v, j)R^{even}(L_v - 1, j) \times P(L_v - 1, j) \dots R^{even}(1, j)P(1, j),$$

$$T^{odd}(j) = P(1, j)R^{odd}(2, j)P(2, j) \dots R^{odd}(L_v, j)P(L_v, j).$$

Статсумма имеет вид

$$Z(t) = +u^T \prod_{k=1}^{L_h/2-1} T^{even}(L_h) (T^{odd}(2k+1)T^{even}(2k)) v_{max},$$

где v_{max} — базисный вектор с максимальным номером, который в нашем представлении соответствует состоянию, в котором все спины принадлежат разным кластерам, а

$$u^T = \{q^{N_{CL}(v_1)}, q^{N_{CL}(v_2)}, \dots, q^{N_{CL}(v_{max})}\},$$

так что

$$u^T v_i = q^{N_{CL}(v_i)},$$

где $N_{CL}(v_i)$ — число разных кластеров в разбиении v_i . Например, для первого базисного вектора $N_{CL}(v_1) = 1$ — единственный кластер, для последнего вектора $N_{CL}(v_{max}) = L_v$ — всего L_v разных кластеров.

Общий алгоритм вычислений таков.

1. Генерируются базисные векторы для полосы требуемой ширины.
2. При помощи этих векторов генерируются матрицы $R(i, j)$, $P(i, j)$ для случаев ф-связи и а-связи (σ_i, σ_j) .
3. При помощи генератора псевдослучайных чисел генерируется распределение примесей на решетке.
4. В соответствии с этим распределением генерируются трансфер-матрицы для модели Поттса и полиномиального инварианта.
5. Вычисляются статсумма модели Поттса и полиномиальный инвариант, значения минимальной энергии и максимальной степени полинома.
6. Повторяются пункты 3–5 и проводится усреднение по различным реализациями примесей на решетке.

Погрешность определялась при усреднении по 10 разным сериям вычислений. Для каждой реализации примесей программа позволяет одновременно получать как полиномиальный инвариант, так и статсумму модели Поттса для произвольного, но фиксированного значения q . Это позволило нам исследовать корреляции между максимальной степенью полинома и минимальной энергией модели Поттса на соответствующей решетке.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

4.1. Корреляция между максимальной степенью полинома Джонса узла и минимальной энергией соответствующей модели Поттса

Рассмотрим зависимость старшей степени полинома Джонса от вида статсуммы модели Поттса. Из формулы (19), явно связывающей инвариант Джонса–Кауффмана и модель Поттса, видно, что если бы переменная x не входила в выражение для вырожденности уровня энергии $H(E; q = 2 + x + x^{-1})$, то старшая степень полиномиального инварианта всегда соответствовала бы члену статсуммы с минимальной энергией.

Если же принять во внимание зависимость кратности вырождения от переменной x , то можно увидеть, что в некоторых случаях происходит взаимное сокращение вкладов в коэффициент перед этой степенью и он обращается в нуль. Простым примером может служить случай без примесей, в котором минимальная энергия есть

$$E_{min} = -(N + 1)/2,$$

а полином Джонса тождественно равен единице и его старшая степень, соответственно, равна нулю.

Тем не менее существует сильная корреляция между максимальной степенью полинома Джонса n и минимальной энергией модели Поттса E_{min} . Поскольку минимальная энергия модели Поттса всегда знакоопределенна и не может быть положительной, мы в дальнейшем будем работать с положительной величиной — модулем минимальной энергии $|E_{min}| = -E_{min}$. На рис. 6а показана совместная вероятность $P(n/N, |E_{min}|/N)$ распределения нормированной максимальной степени n/N и нормированной минимальной энергии $|E_{min}|/N$ для решетки $N = 49$ и концентрации примесей $p = 0.5$, полученная усреднением по $N_L = 10^5$ конфигурациям примесей. В дальнейшем мы обычно будем работать именно с нормированными величинами, так как они определены на отрезках $[0, 1]$ для энергии и $[-1, 1]$ для максимальной степени полинома (она может быть отрицательной). Это позволит нам изображать на одном и том же рисунке графики для разных размеров решеток. На рис. 6а вероятность изображена линиями уровня, причем расстоянию между двумя соседними линиями соответствует разница вероятностей 0.001. Из рисунка видно, что существует сильная корреляция между максимальной степенью инварианта и минимальной энергией модели Потт-

Таблица 1. Коэффициент корреляции $\text{corr}(n_{max}, |E_{min}|)$ и статистическая погрешность для него

L	$\text{corr}(n, E_{min})$	$\Delta \text{corr}(n, E_{min})$
3	0.4871	0.0021
5	0.6435	0.0022
7	0.7205	0.0007
9	0.7692	0.0013
11	0.7767	0.0129

са. Вычисление коэффициента корреляции позволяет количественно проанализировать эту связь.

Напомним определение коэффициента корреляции. Для случайных величин x_1 и x_2 , величин с мажорантами $\langle x_1 \rangle$ и $\langle x_2 \rangle$ и дисперсиями

$$\Delta x_1 = \langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2, \quad \Delta x_2 = \langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2,$$

где $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение, коэффициент корреляции определяется по формуле

$$\text{corr}(x_1, x_2) = \frac{\langle x_1 x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle}{\sqrt{\Delta x_1 \Delta x_2}}.$$

Коэффициент корреляции, равный ± 1 , соответствует линейной зависимости между x_1 и x_2 .

Значения коэффициента корреляции между максимальной степенью полинома n_{max} и минимальной энергией $|E_{min}|$ для концентрации примесей $p = 0.5$ и решеток с линейными размерами $L = 3, 5, 7, 9, 11$ приведены в табл. 1.

Эти данные получены усреднением по $N_L = 10^5$ реализациям примесей для $L = 3-7$, по $N_L = 2 \cdot 10^4$ реализациям для $L = 9$ и по $N_L = 10^3$ реализациям для $L = 11$. Видно, что корреляция увеличивается по мере роста размера решетки L . Аппроксимация этих данных степенной функцией

$$\text{corr}\left(\frac{n}{N}, \frac{|E_{min}|}{N}\right) = 1.04(4) - 1.126(14)L^{-0.65(7)}$$

представлена на рис. 6б. Разумеется, по смыслу коэффициент корреляции не может быть больше единицы — полученное значение является результатом пренебрежения следующими членами разложения функции по степеням $1/L$. Тем не менее результаты аппроксимации демонстрируют, что максимальная степень полинома и минимальная энергия модели Поттса тесно связаны друг с другом и эта связь уси-

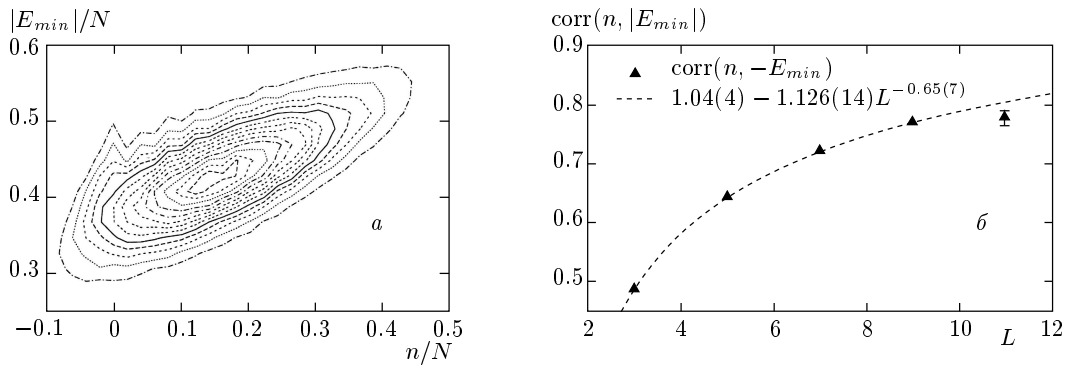


Рис. 6. Совместная вероятность распределения $P(n/N, |E_{min}|/N)$ нормированной максимальной степени полинома n/N и модуля соответствующей нормированной минимальной энергии Поттса $|E_{min}|/N$, построенная при помощи линий уровня с шагом 0.0015 (а). Коэффициент корреляции $\text{corr}(n, |E_{min}|)$ для максимальной степени и модуля минимальной энергии в зависимости от L и его аппроксимация степенной функцией от L (б)

ливается по мере увеличения размера решетки. Поэтому далее, приводя результаты для старшей степени полинома, мы для сравнения будем приводить результаты и для минимальной энергии.

Наличие корреляций между старшей степенью инварианта Кауффмана n и минимальной энергией E_{min} соответствующей модели Поттса для каждой конкретной реализации примесей на решетке представляет не только чисто теоретический интерес, а может быть непосредственно использовано в численных экспериментах. В настоящий момент предельная ширина решетки L в методе трансфер-матриц не превосходит $L = 11$, что связано с большим объемом необходимых вычислений, в то время как определение минимальной энергии модели Поттса может быть осуществлено в рамках стандартного метода Монте-Карло, который требует гораздо меньших вычислительных затрат и, следовательно, может быть легко распространен на решетки гораздо большего размера.

4.2. Вероятность распределения для старшей степени полиномиального инварианта и минимальной энергии соответствующей модели Поттса

В этом разделе приведены результаты, касающиеся вероятности $P(n)$ распределения максимальной степени полинома n . На рис. 7а показана вероятность распределения старшей степени полинома $P(n)$ для $L = 7$ и концентраций примесей $p = 0.1$ (крестики), $p = 0.2$ (квадратики) и $p = 0.5$ (кружки). Данные получены усреднением по $N_L = 10^5$ ре-

ализациям примесей. Статистические погрешности меньше размеров значков.

Мы видим, что для небольших концентраций примесей функция $P(n)$ немонотонна, но она становится монотонной, по форме приближаясь к функции Гаусса, по мере увеличения p . Соответствующая вероятность распределения для минимальной энергии на решетке того же размера $L = 7$ и для тех же концентраций примесей (с использованием тех же значков) показана на рис. 7б. Эта функция выглядит более монотонной, и для данного размера решетки становится похожа на функцию Гаусса уже при небольших концентрациях $p \approx 0.2$.

Вид функций распределения для фиксированной концентрации примесей $p = 0.5$ и разных размеров решеток показан на рис. 8а для максимальной степени полинома и на рис. 8б для минимальной энергии. Размеру решетки $L = 3$ соответствуют крестики, $L = 5$ – квадратики, $L = 7$ – кружки, $L = 9$ – треугольники. Для каждой точки усреднение производилось по $N_L = 10^5$ реализациям примесей для $L = 3, 5, 7$ и $N_L = 5 \cdot 10^3$ для $L = 9$. Вероятность нормирована на 1, т. е.

$$\sum_n P(n) = 1,$$

поэтому по мере увеличения размера решетки увеличивается число значений, которые может принимать нормированная старшая степень $P(n/N)$, а значение функции в каждой точке уменьшается приблизительно как $1/N$. Мы видим, что для небольших размеров решетки $L = 3, 5$ вероятность распределения (n/N) немонотонна, но по мере роста L она становится гладкой гауссообразной функцией.

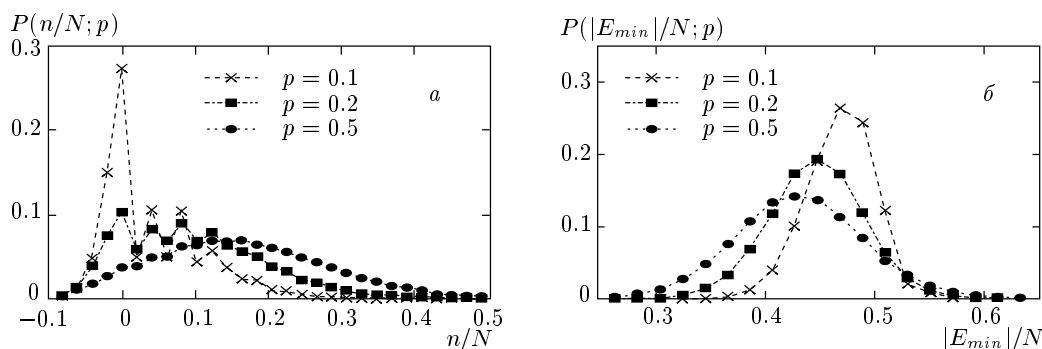


Рис. 7. Вероятность распределения $P(n/N; p)$ нормированной старшей степени полинома n для решетки 7×7 и концентраций примесей $p = 0.1, 0.2, 0.5$ (а). Вероятность распределения $P(|E_{min}|/N; p)$ модуля минимальной энергии E_{min} для решетки 7×7 и концентраций примесей $p = 0.1, 0.2, 0.5$ (б)

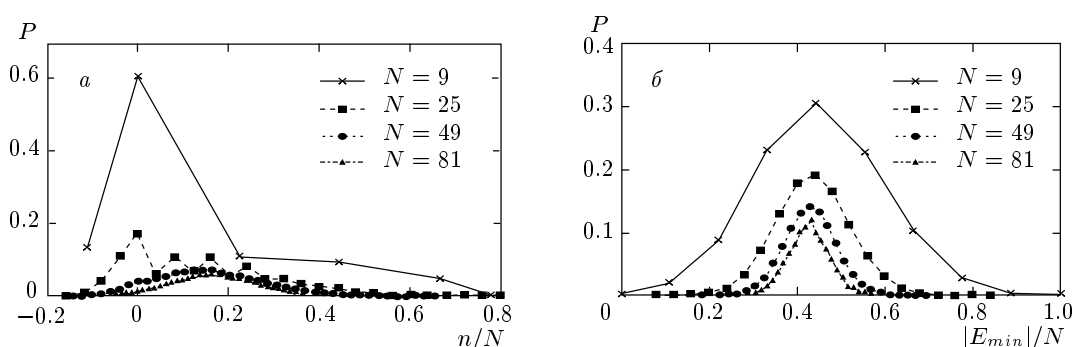


Рис. 8. Вероятность нормированной старшей степени полинома n/N для решеток $N = 9, 25, 49, 81$ при $p = 0.5$ (а). Вероятность модуля нормированной минимальной энергии $|E_{min}|/N$ для решеток $N = 9, 25, 49, 81$ при $p = 0.5$ (б)

Итак, мы можем сделать вывод, что для небольших размеров решеток вероятность распределения $P(n)$ старшей степени полиномиального инварианта является немонотонной функцией из-за влияния граничных условий даже для значительных концентраций примесей. По мере увеличения размера решеток эта немонотонность исчезает и вероятность распределения становится гладкой функцией. По-видимому, можно утверждать, что для любой малой концентрации примесей p найдется такой размер решетки N ($N \gg 1/p$), что для этой решетки вероятность распределения будет гладкой и гауссообразной.

Поскольку мы полагаем, что при больших размерах решеток вероятность распределения определяется функцией Гаусса, то ее основными параметрами являются матожидание (среднее значение) старшей степени полинома и дисперсия. Зависимость среднего значения старшей степени полинома $\langle n/N \rangle$ и дисперсии старшей степени W_{knot}^2 при усреднении по

различным реализациям примесей от p показана на рис. 9а и рис. 9б соответственно. Размеру решетки $L = 3$ соответствуют крестики, $L = 5$ — квадратики, $L = 7$ кружки. Усреднение для каждой точки производилось по 10^5 реализациям примесей для $L = 3, 5$ и $5 \cdot 10^4$ для $L = 7$.

Как и следовало ожидать, при $p = 0$ и $p = 1$ (что соответствует тривиальному узлу) среднее значение и дисперсия максимального показателя степени обращаются в нуль, а максимального значения эти функции достигают при $p \approx 0.5$. Заметим, что данные функции не являются симметричными относительно преобразования $p \rightarrow 1 - p$, так как полиномиальный инвариант Джонса зеркального узла (на диаграмме которого все пересечения заменены на противоположные) получается заменой переменной x на x^{-1} , и максимальной степенью полинома зеркального узла становится минимальная степень «прямого» узла, взятая со знаком минус. Однако эта несимметричность исчезает по мере увеличения

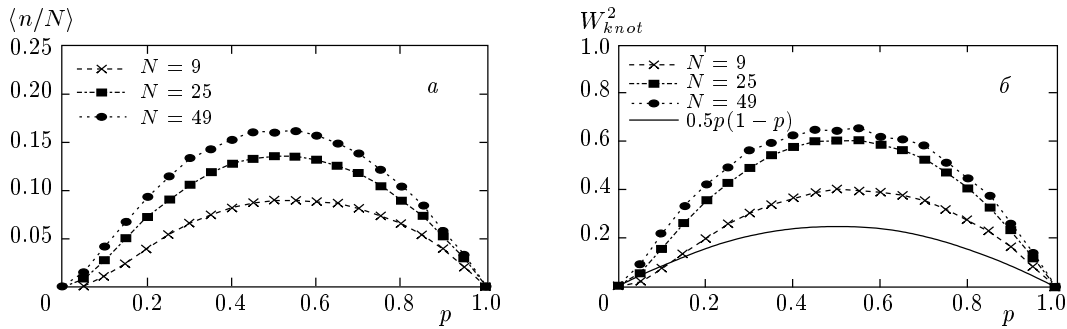


Рис. 9. Средние значения нормированной $\langle n/N \rangle$ старшей степени полинома (а) и дисперсия $W_{knot}^2(p)$ распределения нормированной старшей степени полинома n/N (б) для разных значений $p = 0-1.0$

размера решетки N в результате увеличения числа примесей и числа всех возможных конфигураций примесей, по которым проводится усреднение. На рис. 9б построена также функция $(1/2)p(1-p)$, которая равнялась бы дисперсии распределения, если максимальная степень полинома n была бы линейной функцией от числа примесей M . Таким образом, разница между значениями W_{knot}^2 и $(1/2)p(1-p)$ характеризует дисперсию распределения старшей степени полинома при фиксированном числе примесей M (напомним, что в нашем случае примесь находится в каждом узле с вероятностью p и общее число примесей M флуктуирует).

На рис. 10а и 10б, по параметрам и обозначениям аналогичным рисункам рис. 9а и 9б, изображены модуль средней минимальной энергии $\langle |E_{min}|/N \rangle$ и дисперсия распределения W_{Potts}^2 . «Перекося» среднего значения минимальной энергии связан с тем, что при $p = 0$ ф-связей на одну больше, чем а-связей, а при $p = 1$ ф-связей на одну меньше, чем а-связей. Подробно вероятность распределения минимальной энергии рассмотрены в разд. 2 Приложения.

Мы исследовали зависимость средней нормированной степени полинома (см. рис. 11а) от размера решетки L для $p = 0.5$. Результаты получены усреднением по $N_L = 10^5$ примесям для $L = 3, 5, 7$ и по $N_L = 1.5 \cdot 10^4$ примесям для $L = 9$. Видно, что по мере увеличения $L = \sqrt{N}$ величина $\langle n/N \rangle$ стремится к некому предельному значению. Мы аппроксимировали данные степенной функцией и получили

$$\left\langle \frac{n}{N} \right\rangle \approx 0.334(8) - 0.41(2)L^{-0.48(5)}. \quad (21)$$

Аналогичные данные для нормированной минимальной энергии модели Поттса представлены на рис. 11б. Среднее значение модуля минимальной

энергии убывает по мере увеличения размера решетки и аппроксимируется функцией

$$\left\langle \frac{|E_{min}|}{N} \right\rangle \approx 0.4185(7) + 0.119(3)L^{-1.11(4)}.$$

Некоторые особенности распределения минимальной энергии модели Поттса со случайными ферро- и антиферромагнитными связями при $q \geq 4$, позволяющие получить аналитические результаты при малых ($p \approx 0$) и больших ($p \approx 1$) концентрациях примесей, исследованы в Приложении.

5. ВЫВОДЫ

Сформулируем полученные результаты.

1. Связь статсуммы модели Поттса с полиномиальным инвариантом Джонса-Кауффмана решеточного узла в комбинации с численными методами для модели Поттса позволили исследовать вероятность распределения $P(n/N; p, N)$ старшей степени полинома n для вероятности случайного распределения «проходов» и «переходов» в вершинах квадратной решетки размера $N = L \times L$ для $L = 3-11$.

2. При малых размерах решеток и для небольших концентраций примесей p вероятность распределения максимальной степени полиномиального инварианта $P(n/N; p, N)$ негладкая — более вероятные состояния чередуются с менее вероятными. Данное поведение означает, что при $1/N \lesssim p \ll 1$ узлы некоторых определенных топологических типов трудно реализовать на квадратной решетке в силу геометрических ограничений.

3. По мере увеличения вероятности p вероятность распределения $P(n/N; p, N)$ становится гладкой функцией, по форме приближаясь к функции Гаусса. Типичное значение «сложности узла» η для

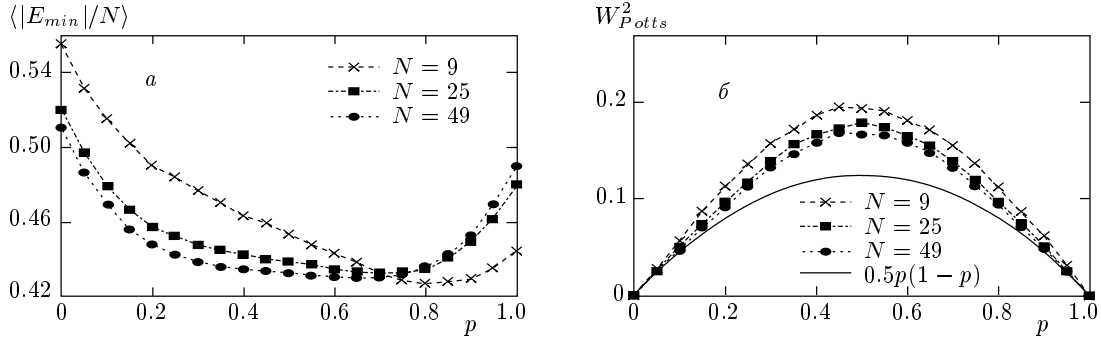


Рис. 10. Средние значения модуля нормированной $\langle |E_{min}|/N$ минимальной энергии (а) и дисперсия $W_{Potts}^2(p)$ распределения нормированной минимальной энергии $|E_{min}|/N$ (б) для разных значений $p = 0-1.0$

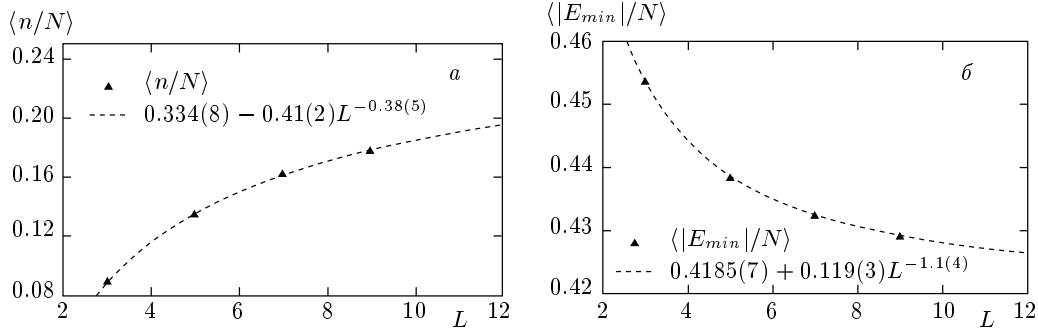


Рис. 11. Среднее значение $\langle n/N$ старшей степени полинома для концентрации примесей $p = 0.5$ и разных $L = \sqrt{N} = 3, 5, 7, 9$; линией показаны результаты аппроксимации $0.334(8) - 0.41(2)L^{-0.38(5)}$ (а). Среднее значение $\langle |E_{min}|/N$ модуля минимальной энергии для концентрации примесей $p = 0.5$ и разных $L = \sqrt{N} = 3, 5, 7, 9$; линией показаны результаты аппроксимации $0.4185(7) + 0.119(3)L^{-1.11(4)}$ (б)

$p = 0.5$ и для решеток большого размера ($N \gg 1$) может быть получено экстраполяцией выражения (21):

$$\eta = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \frac{n}{N} \right\rangle \approx 0.334.$$

4. Существует корреляция между максимальной степенью полиномиального инварианта узла и минимальной степенью энергии на соответствующей этому узлу решетке Поттса при $q \geq 4$.

5. Аналитически получено выражение для вероятности $P(E_{min}/N; p, N)$ в случае малых $p \sim 1/N$ концентраций примесей.

Нами исследованы узлы с квадратной диаграммой. Однако все вычисления могут быть обобщены и на прямоугольную решетку. В связи с этим представляется интересным проверить, зависит ли распределение узлов по топологическим классам лишь от числа пересечений на диаграмме или также и от формы диаграммы. Можно ожидать, что вероятность для прямоугольной диаграммы сильно вытянутой формы будет отличаться от вероятности для

квадратной диаграммы с тем же числом пересечений.

В принципе, предложенный в работе метод применим для исследования узла с произвольной диаграммой (в том числе узлов, диаграммы которых не заполняют прямоугольную решетку плотно), если известна конфигурация системы Поттса, соответствующая этой диаграмме.

Мы полагаем, что предложенная комбинация аналитических и численных методов для исследования топологических проблем с помощью моделей статистической физики является весьма перспективной как для решения топологических задач, так и для нового взгляда на стандартные методы исследования неупорядоченных систем. Приведем в качестве примера следующий факт. В статистической физике одним из основных положений является свойство аддитивности свободной энергии, т. е. пропорциональность свободной энергии объему системы N . Интерпретируя свободную энергию как

топологическую характеристику «сложности» узла, мы приходим к выводу, что «сложность» типичного узла растет линейно с ростом объема системы N . Данное свойство, в свою очередь, хорошо известно в топологии вне контекста статистической физики, является фундаментальным и связано с неабелевостью (некоммутативностью) фазового пространства узлов.

Данная работа является логическим развитием идей, сформулированных в 1992–1993 гг. одним из авторов этой статьи вместе с А. Ю. Гросбергом в [12]. Мы благодарны А. Ю. Гросбергу за интерес к работе и полезные замечания. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 00-15-99302). О. А. В. выражает благодарность комитету стипендии им. Л. Д. Ландау (Forschungszentrum/KFA Jülich) за поддержку.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Распределение минимальной энергии модели Поттса со случайными ферро- и антиферромагнитными связями

1. Независимость минимальной энергии от q при $q \geq 4$

Для топологических инвариантов узлов нас интересует поведение системы при $x \rightarrow \infty$ (см. (20)), что с учетом соотношения

$$q = 2 + x + x^{-1}$$

означает $q \rightarrow \infty$ для соответствующей модели Поттса. Некоторые особенности зависимости свободной энергии системы Поттса от q можно получить из элементарных рассуждений.

В случае, если на решетке нет примесей, а а-связи расположены так, как это показано на рис. 3б и 3в, минимальная энергия не зависит от q при $q \geq 2$: в этом случае достаточно всего двух значений $\sigma = \{1, 2\}$, чтобы «создать» конфигурацию, соответствующую минимальной энергии. Однако при наличии примесей появляется зависимость минимальной энергии от q при $q \geq 2$. Пример для решетки 5×5 и одной примеси на связи между спинами $\sigma_{1,1}$ и $\sigma_{1,2}$ приведен на рис. 5а. Для того чтобы энергия спиновой конфигурации достигла своего минимального для этого распределения связей значения $E_{min} = -12$, необходимо, чтобы все спиновые переменные в узлах, соединенных ф-связями $J = 1$ (на рис. 5а эти узлы показаны белыми и черными кружками), принимали бы одинаковые значения, а

спиновые переменные в узлах $\sigma_{1,1}$, $\sigma_{1,2}$, соединенных а-связями $J = -1$ (на рис. 5а обозначены черным и заштрихованным кружками), принимали бы различные значения; например $\sigma_{1,1} = 2$, $\sigma_{1,2} = 3$. Но если $q = 2$, то невозможно присвоить значения спиновым переменным таким образом, чтобы спины в кластерах $\sigma_{1,1}$, $\sigma_{1,2}$ (а также в кластере, граничащем с ними), показанных на рис. 5а разными цветами (штриховкой), были бы различными, поэтому для $q = 2$ минимальная энергия спинового состояния $E_{min} = -11$ (а не -12).

Как мы убедились, минимальная энергия спиновой конфигурации модели Поттса, соответствующая данному распределению а-связей может зависеть от q – числа состояний спина. Это можно представить следующим образом: для достижения состояния с минимальной энергией требуется, чтобы спиновые переменные в узлах, соединенных ф-связями, принимали бы, по возможности, одно и то же значение (т. е. образовывали бы кластеры), а спиновые переменные в узлах, соединенных а-связями, принимали бы, по возможности, разные значения. Таким образом, данному распределению а-связей соответствует разбиение решетки на независимые кластеры спинов. Спины, принадлежащие одному кластеру, связаны преимущественно ф-связями, спины принадлежащие разным кластерам, связаны а-связями.

Энергия минимальна, если для данного разбиения кластеров соседние кластеры имеют разные значения спиновой переменной. Мы можем сопоставить каждому значению спиновой переменной некоторый цвет. Минимум энергии соответствует такой раскраске данного разбиения решетки на кластеры, при которой все спины в одном кластере имеют одинаковый цвет, а соседние кластеры имеют разные цвета. На рис. 5а приведен пример конфигурации, которую нельзя раскрасить в два цвета, но можно раскрасить в три.

В математике известно утверждение о «раскрашивании карт», гласящее, что любую конфигурацию на плоской поверхности с топологией сферы можно всегда раскрасить четырьмя (и более) цветами. Иными словами, любое разбиение решетки на кластеры можно раскрасить четырьмя (и более) цветами, так что соседние кластеры будут иметь разные цвета. Если отождествить с каждым цветом некоторое значение спиновой переменной $q = \{1, 2, 3, 4, \dots\}$, то мы можем присвоить значения q ($q \geq 4$) так, что все спины в соседних кластерах будут иметь разные цвета. Не существует конфигурации примесей (и соответствующего ей разбиения решетки на кластеры) такой, чтобы четырех значе-

ний спиновой переменной не хватило бы для достижения состояния с минимальной энергией.

Сказанное выше позволяет нам сформулировать следующее утверждение. *Для произвольной конфигурации а-примесей на решетке модели Поттса минимальная энергия спинового состояния не зависит от числа состояний спина q для $q \geq 4$.*

Известно, что при $q \geq 4$ в модели Поттса происходит фазовый переход первого рода. Заметим, что, именно для $q \geq 4$, параметр

$$x = \frac{1}{2} \left(q - 2 \pm \sqrt{q(q-4)} \right)$$

инварианта Кауффмана становится действительным.

2. Распределение минимальной энергии при малых ($p \approx 0$) и больших ($p \approx 1$) концентрациях примесей

Рассмотрим модель Поттса на решетке $L_v \times L_h$ с общим числом связей N и $q \geq 4$. Пусть M — фиксированное число примесей ϵ_k . В случае отсутствия примесей ($M = 0$), число ф-связей есть

$$N_+ = \frac{N+1}{2},$$

число а-связей есть

$$N_- = \frac{N-1}{2}.$$

Расположение а-связей показано на рис. 5а. Минимальная энергия в случае отсутствия примесей есть

$$E_{min} = -N_+.$$

Можно вычислить вероятности $P(E_{min}; M, N)$ распределения минимальной энергии для $M = 1, 2$ перебором всех возможных вариантов. Например, в случае одной примеси ($M = 1$), с вероятностью

$$N_+/N = (N+1)/2N$$

она попадает на ф-связь, в результате чего минимальная энергия увеличивается на единицу, т. е.

$$P(E = -N_+ + 1) = (N+1)/2N.$$

С вероятностью

$$N_-/N = (N-1)/2N$$

примесь попадает на а-связь, и в этом случае минимальная энергия не меняется:

$$P(E = -(N+1)/2) = (N-1)/N.$$

Мы можем провести подобные вычисления для $M = 2$. Обозначим через $C = \sqrt{N}$ число кластеров спинов с одинаковыми q для решетки без примесей. Результаты вычислений приведены в табл. 2, где в одной строке указано: (I) число примесей M , (II) константы связи, на которые попала примесь («+» соответствует $b_{i,j} = 1$ а «-» соответствует $b_{i,j} = -1$), (III) значение минимальной энергии E_{min} , (IV) вероятность получить данное значение энергии $P(E_{min}; M)$,

Если p — вероятность того, что на связи есть примесь $J' = -1$, то вероятность получить число примесей M будет

$$P(M; p) = \frac{N!}{M!(N-M)!} p^M (1-p)^{N-M}.$$

Таким образом, среднее значение минимальной энергии E модели Поттса есть

$$\langle E_{min} \rangle = \sum_{M=0}^N \frac{N!}{M!(N-M)!} \times p^M (1-p)^{N-M} P(E; M, N). \quad (22)$$

Мы можем вычислить первые три члена в этой сумме по данным табл. 2 и получить приближенную формулу для средней энергии:

$$\langle E_{min} \rangle \approx (1-p)^{N-2} \left((1-p)^2 P(E; M=0) + Np(1-p) P(E; M=1) + p^2 P(E; M=2) \right) + o(p^2). \quad (23)$$

Эта формула применима, если вероятность появления трех примесей на решетке мала, т. е.

$$\frac{1}{6} N(N-1)(N-2)(1-p)^{N-3} p^3 \ll 1.$$

Вычислив вероятности концентраций примесей для $M = 1$ и $M = 2$ и используя (22), получим формулу для $\langle E_{min} \rangle$ при малых p . Например, для $M = 1$

$$\langle E_{min}(M=1) \rangle = \left(-\frac{N+1}{2} \right) \left(\frac{N-1}{2N} \right) + \left(-\frac{N+1}{2} + 1 \right) \left(\frac{N+1}{2N} \right) = -\frac{N+1}{2} + \frac{N+1}{2N}.$$

Аналогично,

$$\langle E_{min}(M=2) \rangle = -\frac{N+1}{2} + \frac{N+1}{N} - \frac{12C-8}{N(N-1)}.$$

Отсюда для концентрации примесей p при $p \ll 1$ с учетом того, что $C = \sqrt{N}$, получим выражение

Таблица 2. Вероятности $P(E_{min}; M, N)$ для фиксированного числа примесей $M = 0, 1, 2, N - 2, N - 1, N$ на решетке N

I	II	III	IV
M	связи	E_{min}	$P(E_{min}; M)$
0		$-\frac{N+1}{2}$	1
1	+	$-\frac{N+1}{2} + 1$	$\frac{N+1}{2N}$
1	-	$-\frac{N+1}{2}$	$\frac{N-1}{2N}$
2	++	$-\frac{N+1}{2} + 2$	$\frac{(N+1)(N-1)}{4N(N-1)}$
2	+-	$-\frac{N+1}{2} + 1$	$\frac{(N+1)(N-1) - 16(C-1)}{2N(N-1)}$
2	+-&--	$-\frac{N+1}{2}$	$\frac{(N-1)(N-3) + 16(C-1)}{4N(N-1)}$
2	--	$-\frac{N+1}{2} - 1$	$\frac{4(C-2)}{N(N-1)}$
2	--	$-\frac{N+1}{2} - 2$	$\frac{4}{N(N-1)}$
$N-2$	++	$-\frac{N-1}{2} + 2$	$\frac{(N-1)(N-3)}{4N(N-1)}$
$N-2$	+-	$-\frac{N-1}{2} + 1$	$\frac{(N-1)(N-3) - 16(C-1)}{2N(N-1)}$
$N-2$	+-&--	$-\frac{N-1}{2}$	$\frac{(N+1)(N-1) + 16(C-1) - 4}{4N(N-1)}$
$N-2$	+-&--	$-\frac{N-1}{2} - 1$	$\frac{2(N-1) + 2(C-1)}{N(N-1)}$
$N-2$	--	$-\frac{N-1}{2} - 2$	$\frac{2}{N(N-1)}$
$N-1$	+	$-\frac{N-1}{2} + 1$	$\frac{N-1}{2N}$
$N-1$	-	$-\frac{N-1}{2}$	$\frac{N-3}{2N}$
$N-1$	-	$-\frac{N-1}{2} - 1$	$\frac{2}{N}$
N		$-\frac{N-1}{2}$	1

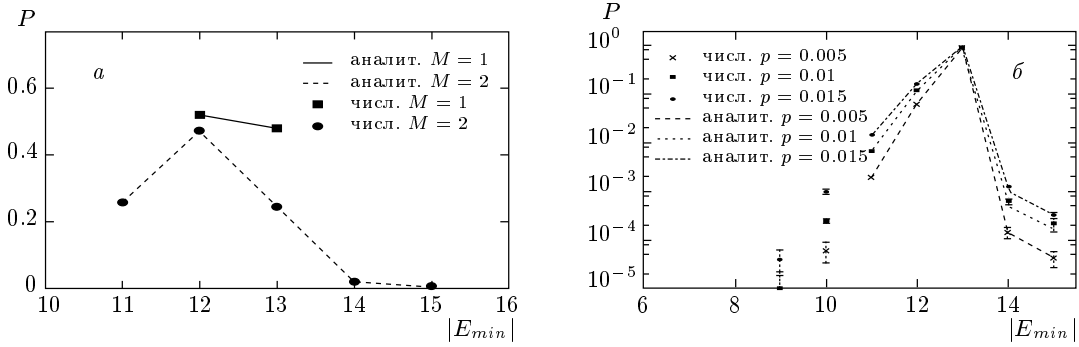


Рис. 12. Сравнение аналитических и численных результатов: вероятности распределения $P(|E_{min}|; M)$ для одной ($M = 1$) и двух ($M = 2$) примесей (а) и $P(|E_{min}|; p)$ для концентрации примесей $p = 0.005, 0.01, 0.015$ (б); $N = 5 \times 5$

для средней нормированной минимальной энергии $\langle e_{min} \rangle = \langle E_{min}/N \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle e_{min}(p) \rangle &= \frac{1}{N} \left[(1-p)^N P(E; M=0) + \right. \\ &\quad \left. + Np(1-p)^{N-1} P(E; M=1) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} N(N-1)p^2(1-p)^{N-2} P(n; M=2) + o(p^2) \right] = \\ &= -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) + p \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{N} \right) - \\ &\quad - p^2 \frac{6\sqrt{N}-4}{N} + o(p^2). \end{aligned} \quad (24)$$

Аналогичные вычисления для концентраций $(1-p) \ll 1$ дают

$$\begin{aligned} \langle E_{min}(M=N-1) \rangle &= -\frac{N-1}{2} + \frac{N-5}{2N}, \\ \langle E_{min}(M=N-2) \rangle &= -\frac{N-1}{2} + \frac{N-5}{N} - \frac{10C-14}{N(N-1)}, \end{aligned}$$

и, соответственно,

$$\begin{aligned} \langle e_{min}(p) \rangle &= \frac{1}{N} \left[p^N P(E; M=N) + N(1-p) \times \right. \\ &\quad \times p^{N-1} P(E; M=N-1) + \frac{1}{2} N(N-1) \times \\ &\quad \times (1-p)^2 p^{N-2} P(n; M=N-2) + o(p^2) \left. \right] = \\ &= -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) + (1-p) \frac{1}{2} \left(1 - \frac{5}{N} \right) - \\ &\quad - (1-p)^2 \frac{5\sqrt{N}-7}{N} + o((1-p)^2). \end{aligned} \quad (25)$$

Результаты вычислений по формулам табл. 2, а также численный счет для $q = 4$ и решетки $L_v = 3$,

$L_h = 6$, соответствующей узлу с квадратной диаграммой 5×5 , показаны на рис. 12а и 12б. По оси абсцисс отложено значение модуля минимальной энергии, по оси ординат — вероятность этого значения. На рис. 12а представлены результаты для фиксированного числа примесей $M = 1$ (квадраты) и $M = 2$ (кружки), а на рис. 12б — для концентрации примесей $p = 0.005$ (крестики) $p = 0.01$ (квадраты), $p = 0.15$ (кружки). Результаты вычисления по формулам табл. 2 и формуле (23) показаны линией, результаты вычислений по методу Монте-Карло — символами. Усреднение производилось по $N_L = 10^5$. Статистическая погрешность для большинства точек меньше размера символов. Видно, что численные результаты замечательно совпадают с аналитическими. На рис. 12б аналитические результаты присутствуют только для точек $|E_{min}| = 11-15$, для которых ответ можно получить разложением в ряд до членов p^2 . Таким образом, мы численно проверили аналитические вычисления этого раздела.

Сделаем некоторые замечания, касающиеся вида нормированной минимальной энергии

$$\langle e_{min}(p; N) \rangle = \left\langle \frac{|E_{min}(p; N)|}{N} \right\rangle$$

при $N \rightarrow \infty$. На рис. 9б мы видим, что для решеток $N = 25, 49$ график функции $e_{min}(p; N)$ выглядит как несимметричное «корыто». При $N \rightarrow \infty$ значения этой функции в точках $p = 0$ и $p = 1$, а именно

$$\langle e_{min}(p=0; N) \rangle = 0.5 \left(1 + \frac{1}{N} \right)$$

и

$$\langle e_{min}(p=1; N) \rangle = 0.5 \left(1 - \frac{1}{N} \right)$$

станут равны и «корыто» станет симметричным относительно преобразования $p \rightarrow 1 - p$. «Дно» будет находиться на уровне

$$\langle e(p = 0.5; N \rightarrow \infty) \rangle = 0.415(7)$$

(см. рис. 11б). Из формул (24) и (25) видно, что вторая производная этой функции по p в точках $p = 0$ и $p = 1$ при $N \rightarrow \infty$ обратится в нуль. Возможно, обратятся в нуль и все производные более высокого порядка. В этом случае в точках, соответствующих «углам корыта», производная $\frac{d}{dp}e(p; N = \infty)$ будет иметь разрыв.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. K. Nechaev, УФН **168**, 369 (1998).
2. М. Д. Франк-Каменецкий, А. В. Вологодский, УФН **134**, 641 (1981); А. В. Вологодский и др., ЖЭТФ **66**, 2153 (1974); А. В. Вологодский, А. В. Лукашин, М. Д. Франк-Каменецкий, ЖЭТФ **67**, 1875 (1974); М. Д. Frank-Kamenetskii, A. V. Lukashin, and A. V. Vologodskii, Nature (London) **258**, 398 (1975).
3. V. F. R. Jones, Ann. Math. **126**, 335 (1987).
4. V. F. R. Jones, Bull. Am. Math. Soc. **12**, 103 (1985).
5. J. Birman, *Knots, Links and Mapping Class Groups*, Ann. Math. Studies **82**, Princeton Univ. Press (1976).
6. А. Б. Сосинский, В. В. Прасолов, *Узлы, зацепления, косы и трехмерные многообразия*, МЦНМО, Москва (1997).
7. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической физике*, Мир, Москва (1985).
8. W. B. R. Likorish, Bull. London Math. Soc. **20**, 558 (1988); M. Wadati, T. K. Deguchi, and Y. Akutso, Phys. Rep. **180**, 247 (1989).
9. L. H. Kauffman, Topology **26**, 395 (1987).
10. L. H. Kauffman and H. Saleur, Comm. Math. Phys. **141**, 293 (1991).
11. F.Y. Wu, J. Knot Theory Ramific. **1**, 47 (1992).
12. A. Yu. Grosberg, S. Nechaev, J. Phys. (A): Math. Gen. **25**, 4659 (1992); A.Yu. Grosberg, S. Nechaev, Europhys. Lett., **20**, 613 (1992)
13. H. W. Blote and M. P. Nightingale, Physica A **112**, 405 (1982).
14. J. L. Jacobsen and J. Cardy, E-print archives cond-mat/9711279.
15. J. Salas and A. D. Sokal, E-print archives cond-mat/0004330.
16. A. Yu. Grosberg, S. K. Nechaev, and E. I. Shakhnovich, J. de Phys. **49**, 2095 (1988).
17. B. Chu, Q. Ying, and A. Grosberg, Macromolecules **28**, 180 (1995); A. Grosberg, Y. Rabin, S. Havlin, and A. Neer, Europhysics Lett. **23**, 373 (1993); J. Ma, J. E. Straub, and E. I. Shakhnovich, J. Chem. Phys. **103**, 2615 (1995).
18. K. Reidemeister, *Knotentheorie*, Springer, Berlin (1932).
19. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
20. C. M. Fortuin and P. M. Kasteleyn, Physica **57**, 536 (1972).
21. R. H. Swendsen and J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
22. U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1988).