MSC 82B43

НЕСПРЯМЛЯЕМЫЕ ПУТИ НА ПЕРИОДИЧЕСКИХ ГРАФАХ

Е.С. Антонова, Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: antonova_e@bsu.edu.ru, virch@bsu.edu.ru

Связный граф $\langle V, \Phi \rangle$ со счетным множеством вершин V и отношением смежности $\Phi \subset V^{(2)}$ ($V^{(2)}$ – множество всех пар вершин из V), у которого каждая вершина имеет конечный индекс, называется периодическим, если он допускает такое вложение $\mathfrak{J}$ в $\mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, при котором существует базис $\langle \mathsf{e}_1, ..., \mathsf{e}_d \rangle$ в $\mathbb{R}^d$, что имеет место

$$\mathfrak{J}V + n\mathsf{e}_i = \mathfrak{J}V \,, \qquad \mathfrak{J}\Phi + n\mathsf{e}_i = \mathfrak{J}\Phi \,, \qquad n \in \mathbb{Z}, i = 1 \div d \,,$$

называется *периодическим.* При этом число d называется его размерностью [1].

Периодические графы являются топологическими моделями кристаллических решеток.

Всякая последовательность $\langle x \equiv x_0, x_1, ..., x_n \rangle$, $x_i \in V$, в которой $\{x_{i-1}, x_i\} \in \Phi$ $i = 1 \div n$ является путем длины n на графе $\langle V, \Phi \rangle$. Путь на графе называется *неспрямляемым* [2], если для любой пары его компонент $x_i \neq x_j$, $i \neq j$ имеет место $\{x_i, x_j\} \notin \Phi$, $|i-j| > 1$.

Пусть $\mathsf{N}(n, x)$ – функция, значения которой при каждом $n \in \mathbb{N}$ равно числу неспрямляемых путей длины n с начальной вершиной $x \in V$. Очевидно, что при фиксированном базисе $\langle \mathsf{e}_1, ..., \mathsf{e}_d \rangle$ образа вложения $\mathfrak{J}$ периодического графа имеет место $\mathsf{N}(n, x + l\mathsf{e}_i) = \mathsf{N}(n, x)$, $l \in \mathbb{Z}$, $i = 1 \div d$.

Изучение функции $\mathsf{N}(\cdot, x)$ представляет интерес в теории перколяции при $d = 2$ и в статистической теории систем полимерных цепей $d = 2, 3$. В последнем случае, на ее основе оценивается энтропия основного состояния таких систем статистической механики. Для этой функции справедлива элементарная асимптотическая оценка

$$\ln \mathsf{N}(n, x) = n(a + O(1)) \,, \quad n \to \infty \,,$$

в которой число $a > 0$ является характеристикой графа и не зависит от x. Наоборот, остаточный член в этой формуле зависит от вершины (если граф не является однородным), однако, на сегодняшний день относительно него не существует никаких строгих оценок, равно как и не имеется регулярной процедуры вычисления с гарантированной оценкой точности вычислений константы в представленной формуле.

В работе функция $\mathsf{N}(n, x)$ вычисляется на основе компьютерной программы для простейших периодических графов для простейших периодических графов при $d = 2, 3$, представляющих прикладной интерес, для возможно больших значений n. Представленные в нижележащих таблицах названия периодических графов соответствуют тем кристаллическим решеткам, моделями которых они являются. Во всех этих примерах число путей не зависит от вершины x.

Основная трудность при реализации программы вычисления значений функции $\mathsf{N}(\cdot, x)$ состоит в том, что она основана на переборе всех возможных путей и при этом для вычисления каждого последующего значения $\mathsf{N}(n+1, x)$ необходима организация хранения информации о всех путях длины n. Это связано с тем, что функция $\mathbb{N}(\cdot, x)$ для периодических графов при $d > 1$ не подчинена никакому разностному уравнению конечного порядка, как это имеет место, например, для бесконечных графов типа деревьев.

Ниже приводятся значения функции $\mathsf{N}(n, x)$, полученные посредством компьютерного расчета только для максимально допустимого для используемого авторами компьютера значения n. В правой колонке таблиц даны значения функции $(\mathsf{N}(n), x)^{1/n}$, которая, согласно полученным результатам расчета, довольно быстро выходит на предельное значение $\lim\limits_{n\to\infty} (\mathsf{N}(n), x)^{1/n}$, являющееся одной из характеристик топологии бесконечного периодического графа.

$d = 2$

Тип решётки	N(15, x)	$(\mathsf{N}(n))^{1/n}$
Треугольная решетка	20110806	3,0682
Квадратная решетка	932628	2,5002
Квадратная сопряженная решетка	1384181952	4,0683
Шестиугольная решетка	17760	1,9199

$d = 3$

Тип решётки	N(10, x)	$(\mathsf{N}(n))^{1/n}$
Простая кубическая решетка	2675022	4,3927
Гексагональная решетка	364214	3,5986
Гранецентрированная кубическая решетка	93125370	6,2647
Объемоцентрированная кубическая решетка	315891902	7,0787

Литература

1. Kesten H. Percolation Theory for Mathematicians/ H.Kesten. – Boston: Birkhauser, 1982.

2. Антонова Е.С., Вирченко Ю.П. Конечные кластеры на плоских мозаиках. Часть 3. Теорема о внешней границе // Belgorod State University Scientific Bulletin. – 2011. – 23(118);25. – С.112-126.