

## ОЦЕНКА ЧИСЛА ОГРАНИЧЕННЫХ ЗАПОЛНЕННЫХ КЛАСТЕРОВ С ФИКСИРОВАННОЙ ВЕРШИНОЙ НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЁТКЕ

Е.С. Антонова, Ю.П. Вирченко

Белгород, БелГУ; antonova\_e\_s@mail.ru; virch@bsu.edu.ru

Дается верхняя оценка числа ограниченных многогранников с заданной величиной площади поверхности, которые не имеют внутренних пустот, сложены из элементарных кристаллических ячеек простой кубической решетки и содержат некоторый фиксированный её узел. Это число играет большую роль в статистической механике решеточных систем и дискретной теории перколяции. Полученная оценка аналогична известной оценке числа ограниченных циклов заданной длины без самопересечений на плоской квадратной решетке.

**Ключевые слова:** кубическая решетка, ограниченный кластер, верхняя оценка.

**1. Введение.** В статистической механике [1] и дискретной теории перколяции [2] известен метод кластерного разложения, который позволяет доказывать, в первом случае, существование фазового перехода второго рода в решеточных моделях ферромагнитного типа, а, во втором случае, наличие порога перколяции. Одной из существенных составляющих метода кластерного разложения, является получение оценки числа ограниченных кластеров с заданной величиной площади поверхности, содержащих фиксированную вершину решетки и которые представляют собой связанные множества узлов решетки, находящихся в одном и том же фазовом физическом состоянии. Геометрически, они представляются в виде связанных ограниченных многогранников, составленных из элементарных кристаллических ячеек решетки и не содержащих внутренних пустот. Число таких геометрических образований определяет величину комбинаторной энтропии статистической системы, состоящей из узлов кристаллической решетки, которые случайным образом могут находиться в различном фазовом состоянии. Значение комбинаторной энтропии играет решающую роль при формировании физически нового фазового состояния всей системы в целом. Поэтому, её вычисление на основе микроскопического распределения вероятностей в рамках статистической теории фазовых переходов, для системы, испытывающей фазовое превращение, с одной стороны, является главной составляющей при определении термодинамических характеристик, а, с другой стороны, представляет сложную математическую проблему. Впервые на роль комбинаторной энтропии при возникновении фазового превращения указал Пайерлс [3], где было показано существование фазового перехода в двумерной модели Изинга ферромагнитного типа. Его рассуждения были основаны на элементарной оценке числа замкнутых несамопересекающихся контуров, которые могут быть расположены на квадратной решетке таким образом, чтобы они заключали внутри себя некоторую заранее фиксированную вершину решетки. Его рассуждения привели к появлению метода кластерного разложения, сначала, в статистической механике, а, затем, в теории перколяции. В частности, на основе аналогичных рассуждений, в работе [4] было доказано существование фазового перехода в трёхмерной модели Изинга, где была использована оценка числа многогранников с фиксированной величиной поверхности, аналогичная оценке Пайерлса. Однако, в этой работе, такая оценка не доказывалась, а была высказана только общая идея, на основе которой это доказательство может быть получено. В настоящей работе, мы восполняем имеющийся пробел и даём подробное доказательство указанной оценки.

**2. Постановка задачи.** Пусть  $Z^3$ - множество точек в  $R^3$  с целочисленными декар-

товыми координатами в базисе относительно репера единичных векторов

$$\langle e_1 = \langle 1, 0, 0 \rangle, e_2 = \langle 0, 1, 0 \rangle, e_3 = \langle 0, 0, 1 \rangle \rangle.$$

Пусть на этом множестве введено отношение связности, которое определяется множеством рёбер, получаемом из множества рёбер  $\{\{0, e_1\}, \{0, e_2\}, \{0, e_3\}\}$  произвольными трансляциями на  $Z^3$ . Множество  $Z^3$ , снабжённое указанным отношением связности, называется трёхмерной кубической решёткой. Введём множество  $\Gamma$  ограниченных многогранников в  $R^3$ , угловыми точками которых являются точки из  $Z^3$ . Потребуем также, чтобы границы многогранников из  $\Gamma$  были плоскими и представляли собой объединения единичных квадратов с угловыми токами

$$\begin{aligned} & \{\langle i + \alpha, j + \alpha, k \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \{\langle i, j + \alpha, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \\ & \{\langle i + \alpha, j, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \langle i, j, k \rangle \in Z^3 \end{aligned} \quad (1)$$

Другое, эквивалентное определение многогранников из  $\Gamma$  состоит в том, что каждый из них представляет собой объединение единичных кубов с угловыми точками

$$\{\langle i + \alpha, j + \alpha, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \langle i, j, k \rangle \in Z^3.$$

Пусть  $G \in \Gamma$ . Точку, не принадлежащую  $G$  будем называть внутренней по отношению к  $G$ , если любой непрерывный путь, начинающийся в этой точке и уходящий на бесконечность, обязательно пересекает  $G$ . Многогранник из  $\Gamma$ , не содержащий внутренних точек, будем называть заполненным. Множество всех заполненных многогранников будем обозначать  $\bar{\Gamma}$ .

С каждым единичным кубом, имеющим угловые точки  $\{\langle i + \alpha, j + \alpha, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \langle i, j, k \rangle \in Z^3$  свяжем характеризующую его точку  $x = \langle i + 1/2, j + 1/2, k + 5 \rangle$  - центр куба. Множество всех таких характеристических точек совпадает с  $Z^3 + x_0, x_0 = \langle 1/2, 1/2, 5 \rangle$ . Класс всех многогранников из  $\bar{\Gamma}$ , содержащих фиксированную характеристическую точку  $x \in Z^3 + x_0$ , обозначим  $\bar{\Gamma}(x)$ . Наконец, множество всех характеристических точек фиксированного многогранника  $G \in \Gamma$  будем называть кластером, соответствующим  $G$ .

Очевидно, что

$$\bar{\Gamma} = \bigcup_{x \in Z^3 + x_0} \bar{\Gamma}(x)$$

и все классы  $\bar{\Gamma}(x), x \in Z^3 + x_0$  находятся во взаимно однозначном соответствии друг с другом. Каждое такое соответствие устанавливается посредством подходящей операции параллельного переноса. По этой причине, в дальнейшем, мы будем интересоваться только множеством  $\Gamma^* = \bar{\Gamma}(x_0)$ .

Границы многогранников из  $\Gamma^*$  представляют собой замкнутые двусторонние поверхности. Очевидно, что площадь поверхности  $\sum(G)$  многогранника  $G \in \Gamma^*$ , которую мы будем обозначать посредством  $|\sum(G)|$  принимает чётные значения из  $N$ . Более того,  $|\sum(G)| \geq 6$ . С топологической точки зрения, для любого значения  $r \in N_+$ , в классе  $\Gamma^*$  имеются многогранники  $G$ , род граничной поверхности  $\sum(G)$  которых принимает значение  $r$ .

Обозначим посредством  $\Gamma_n$  подмножество многогранников из  $\Gamma^*$ , имеющих одну и ту же площадь поверхности, равную  $n$ . Множество  $\Gamma^*$  представляется в виде дизъюнктивного объединения



$$\Gamma^* = \bigcup_{k=2}^{\infty} \Gamma_{2k}.$$

Целью нашей работы будет нахождение верхней оценки числа  $|\Gamma_n|$  как функции от  $n \in \mathbb{N}$ .

**3. Класс  $\Gamma_{n,l}$ .** Пусть зафиксирована ось  $e_l$ . По отношению к этой оси, определим, для данного  $n$  и для каждого  $l \in \mathbb{N}_+$ , подкласс  $\Gamma_{n,l}$ . К этому подклассу отнесём те и только те многогранники из  $\Gamma_n$ , для которых полуось, с началом в точке  $\langle 1/2, 1/2, 1/2 \rangle$  и направленная вдоль  $e_l$ , имеет в качестве первой (и может быть единственной) точки пересечения с  $\Sigma(G)$  точку  $x_l = \langle 1/2 + l, 1/2, S \rangle$ . Очевидно, что, для значений  $l > (n-2)/4 - l = \bar{n}$ ,  $\Gamma_{n,l}$  пусты, так как, при заданной величине  $l$ , минимальной площадью поверхности обладает параллелепипед, два торца у которого перпендикулярны оси  $e_l$  и имеют единичную площадь. При этом четыре параллельных ребра, соединяющих эти торцы, имеют длину  $(l+1)$ , и, поэтому, площадь поверхности такого параллелепипеда равна  $[4(l+1) + 2]$ .

Имеет место дизъюнктивное разложение

$$\Gamma_n = \bigcup_{l=0}^{\bar{n}} \Gamma_{n,l}$$

и, следовательно,

$$|\Gamma_n| = \sum_{l=0}^{\bar{n}} |\Gamma_{n,l}|. \quad (2)$$

По этой причине, для получения верхней оценки числа  $\Gamma_n$ , достаточно найти, для каждого  $l = 1, \dots, \bar{n}$ , верхнюю оценку числа  $|\Gamma_{n,l}|$ .

Для получения требуемой оценки, определим класс  $\Sigma_{n,l}$  поверхностей, составленных из единичных квадратов с угловыми точками на кубической решётке. Этот класс является более широким по отношению к классу  $\{\Sigma(G); G \in \Gamma_{n,l}\}$ . Он состоит из специальных двусторонних поверхностей без самопересечений, которые имеют первое (в направлении от точки  $\langle 1/2, 1/2, 1/2 \rangle$ ) пересечение с осью  $e_l$  в точке  $x_l = \langle 1/2 + l, 1/2, S \rangle$ . С топологической точки зрения, эти поверхности являются либо замкнутыми двусторонними поверхностями, либо поверхностями, полученными из таких замкнутых поверхностей посредством вырезания некоторого конечного набора отверстий. Поверхности составлены из единичных квадратов вида  $(I)$  и, если они не замкнуты, то для каждой из них, число квадратов входящих в соответствующее объединение равно  $(n-l)$ . Эти поверхности определяются посредством конструирующего их алгоритма, который описывается в следующем пункте. Этот алгоритм построен таким образом, что множество  $\{\Sigma(G); G \in \Gamma_{n,l}\}$  находится во взаимно однозначном соответствии с некоторым подмножеством из  $\Sigma_{n,l}$  и, поэтому,  $|\Gamma_{n,l}| < |\Sigma_{n,l}|$ . Следовательно,

$$|\Gamma_n| < \sum_{l=0}^{\bar{n}} |\Sigma_{n,l}|. \quad (3)$$

Нашей целью, теперь, является нахождение подходящей верхней оценки числа  $\Sigma_{n,l}$ . Эта оценка будет следовать, непосредственно, из алгоритма, конструирующего все поверхности класса  $\Sigma_{n,l}$ .

**4. Оценка числа  $\Sigma_{n,l}$ .** Необходимый нам алгоритм состоит из последовательного построения поверхностей различного уровня  $m=0, 1, 2, \dots$ . На каждом уровне  $m$  поверхности строятся последовательным подклеиванием единичных квадратов. Это подклеивание представляет собой отождествление рёбер подклеиваемого квадрата (по крайней мере, одного) с соответствующим числом рёбер квадратов, которые составляют край уже построенной поверхности предыдущего уровня  $(m-1)$  и, возможно, с рёб-

рами уже подклеенных квадратов на уровне  $m$ .

Описание алгоритма даётся индукцией по номеру уровня  $m \in \mathbb{N}_+$ . Поэтому, оно распадается на три части:

- 1) должно быть описано начало алгоритма для нулевого уровня;
- 2) должен быть описан индукционный шаг от уровня  $m$  к уровню  $(m+1)$ ;
- 3) должен быть описан критерий остановки исполнения алгоритма.

1. Началом алгоритма является единственная поверхность нулевого уровня, которая представляет собой единичный квадрат, содержащий точку  $x_i$ . По определению, внешняя нормаль этого квадрата направлена по направлению  $e_j$ . Она определяет внешнюю сторону квадрата. На квадрате отмечается одно ребро, которое мы называем первым среди рёбер из входящих в состав края этой поверхности нулевого уровня. На контуре, который является краем этого квадрата, задаётся ориентация против часовой стрелки относительно направления  $e_j$ .

Заметим, что у каждой поверхности, получаемой в результате подклеивания очередного квадрата на любом уровне построения поверхности, определены внешняя и внутренняя стороны. Внешняя сторона выявляется посредством непрерывного движения по стороне поверхности без пересечения края поверхности, начиная это движение с внешней стороны первого квадрата.

2. Пусть построена поверхность уровня  $m$ . На ней, как указано выше, выделены внешняя и внутренняя стороны. Край этой завершённой поверхности уровня  $m$  может быть несвязным. Каждая связная компонента края поверхности является простым кусочно-линейным циклом, составленным из последовательности рёбер решётки  $Z^3$ , то есть из пар вида

$$\{(i, j, k), \langle i+1, j, k \rangle\}, \{(i, j, k), \langle i, j+1, k \rangle\}, \text{ либо } \{(i, j, k), \langle i, j, k+1 \rangle\},$$

$\langle i, j, k \rangle \in Z^3$ . Причём под несвязными циклами здесь понимаются циклы, не имеющие ни одного общего ребра.

В результате построения поверхности уровня  $m$ , на каждой отдельной связной компоненте края этой поверхности имеется отмеченное ребро, которое входит в состав этой компоненты, и на каждой из этих компонент задана ориентация, которая выбирается против часовой стрелки относительно направления наружу из этой поверхности. Кроме того, зафиксирован порядок на множестве всех таких связных компонент края поверхности уровня  $m$ . Всё множество рёбер края поверхности  $\Sigma^{(m)}$  упорядочено согласно порядку циклов, в которых они находятся, и затем внутри каждого цикла, согласно его ориентации, начиная с первого ребра на каждом из них.

Построим индукционный шаг от уровня  $m$  к уровню  $(m+1)$ , то есть, по заданной поверхности  $\Sigma^{(m)}$  уровня  $m$ , вместе с зафиксированным порядком на множестве связных компонент её края, а также, вместе с выделенными на каждой связной компоненте края ориентацией обхода и первым рёбром. Поверхность  $\Sigma^{(m+1)}$  уровня  $(m+1)$  строится вместе с указанием первых рёбер и ориентаций на связных компонентах края этой поверхности. Построение поверхности  $\Sigma^{(m+1)}$ , как указывалось выше, состоит в последовательном приклеивании некоторого множества единичных квадратов. При приклеивании каждого конкретного квадрата, должно соблюдаться следующее правило. Те его рёбра, несовпадающие с ребром, по которому производится приклеивание, но которые, после приклеивания, совпали с рёбрами уже построенной к данному шагу поверхности, должны быть также приклеены к тем рёбрам, с которыми они совпадают. При такой договорённости, допустимыми для приклеивания квадратами на каждом шаге построения, являются такие, которые приводят к поверхности указанного выше топологического типа. Заметим, что в любом случае, имеется не более трёх возможностей выбора квадрата для приклеивания.



Конструкцию поверхности  $\Sigma^{(m+1)}$  определим индукцией по номеру  $k$  подклеиваемого квадрата. Поэтому, она состоит из трёх пунктов: указания первого шага, индукционного перехода от одного шага построения к следующему шагу и указания момента остановки построения.

2.1. На первом шаге построения поверхности уровня  $(m+1)$ , приклеим допустимым образом единичный квадрат к первому ребру  $\alpha_1$  поверхности  $\Sigma^{(m)}$ . Если ребро  $\alpha_1$ , которое является противоположным в этом квадрате к ребру  $\alpha_1$ , по которому производилось приклеивание, принадлежит краю вновь образуемой поверхности  $\Sigma^{(m+1)}$  уровня  $(m+1)$ , то оно объявляется первым в первом цикле, составляющем этот край. Однако, это ребро может не принадлежать краю поверхности  $\Sigma^{(m+1)}$  в том случае, если оно совпало с одним из рёбер края поверхности  $\Sigma^{(m)}$ . Если реализовалась такая ситуация, то переходим к подклеиванию следующего квадрата. Причём, может быть две ситуации: в первом случае, приклеивание первого квадрата не оставляет свободными ни одно из его рёбер – ни одно из них не может входить в состав края новой поверхности  $\Sigma^{(m+1)}$ ; во втором случае, после подклеивания первого квадрата, некоторые рёбра первого квадрата остались свободными, и подклеивание следующего квадрата осуществляется к первому по порядку на первом цикле свободному в нём ребру.

В первом случае, подклеиванием первого квадрата закончился первый цикл, то есть он приклеился всеми своими рёбрами к поверхности  $\Sigma^{(m)}$ . Тогда процесс приклеивания допустимым образом новых квадратов к рёбрам первого цикла прекращается и происходит переход к следующему циклу края поверхности  $\Sigma^{(m)}$ , то есть следующий квадрат подклеивается к первому ребру второго цикла края поверхности  $\Sigma^{(m)}$ . Если цикл в крае поверхности был при этом единственным, то процесс построения поверхности  $\Sigma^{(m+1)}$  заканчивается.

Во втором случае, происходит образование двух новых циклов. Следующий по порядку квадрат лежит в одном из них он считается первым в этом цикле. Для того чтобы реализовать алгоритм в другом цикле, нужно задать в нём первое ребро. Таким мы будем считать ребро с номером, минимальным в порядке следования на рассматриваемом цикле края поверхности  $\Sigma^{(m)}$  среди попавших в этот второй из числа вновь образовавшихся циклов.

2.2. Пусть произведено  $k$  подклеиваний единичных квадратов к рёбрам края поверхности  $\Sigma^{(m)}$ . Тогда,  $(k+1)$ -й квадрат подклеивается допустимым образом к первому же, по порядку следования, ребру  $\alpha_k$  в крае поверхности  $\Sigma^{(m)}$ , которое принадлежит тому же циклу, где был приклеен предыдущий  $k$ -й квадрат.

Если противоположное к  $\alpha_k$  ребро  $\alpha_k$  приклеиваемого квадрата остаётся свободным, то можно переходить к подклеиванию следующего квадрата.

Если же противоположное ребро  $\alpha_k$  также склеивается с каким-то ребром края поверхности  $\Sigma^{(m)}$ , то, при таком подклеивании, образуются два новых цикла. Дальнейшая подклейка квадратов поверхности  $\Sigma^{(m+1)}$  в каждом из них осуществляется таким же образом, как и в соответствующем случае, описанном в п.2.1.

Если подклеиванием  $k$ -го квадрата исчерпались все рёбра текущего цикла, то  $(k+1)$ -й квадрат является первым в следующем цикле и принцип его подклеивания описан в п.2.1.

2.3. Поверхность  $\Sigma^{(m+1)}$  считается построенной тогда, когда все рёбра края поверхности  $\Sigma^{(m)}$  перестают входить в состав края поверхности, возникшей после приклеивания очередного квадрата.

3. Остановка алгоритма может произойти по двум причинам. Во-первых, число использованных, в процессе подклеивания, квадратов достигло значения  $(n-1)$ . Тогда, независимо от того, произошло ли завершение построения поверхности  $\Sigma^{(m)}$  текущего уровня  $m$  или нет, дальнейшее подклеивание квадратов прекращается. Во-вторых,

подклеивание квадратов прекращается после завершения очередного уровня  $m$  построения поверхности  $\sum_{n,l}$  если поверхность  $\sum^{(m)}$  замкнута, то есть у неё отсутствует край и переход к следующему уровню невозможен.

**5. Оценка числа  $|\Gamma_{n,l}|$ .** Из приведенного выше алгоритма построения поверхности класса  $\sum_{n,l}$  следует, что для каждого подклеивания квадрата, увеличивающего площадь поверхности на единицу, имеется не более трёх допустимых возможностей. Так как, в процессе конструирования производится  $(n-2)$  подклеивания, то в классе  $\sum_{n,l}$  имеется не более чем  $3^{n-2}$  поверхностей. Поверхности этого класса, либо не являются замкнутыми, либо обладают площадью поверхности меньшей чем  $n$ . Рассмотрим незамкнутые поверхности из  $\sum_{n,l}$ . Среди них имеются такие, что приклеивание к ним одного квадрата превращает их в замкнутые поверхности, которые имеют площадь, равную  $n$ . С другой стороны, для любой замкнутой поверхности, которая является границей многогранника класса  $\Gamma_{n,l}$ , найдётся единственная незамкнутая поверхность класса  $\sum_{n,l}$ , обладающая таким свойством.

Для доказательства последнего положения, достаточно построить каждую из поверхностей  $\sum(G)$ ,  $G \in \Gamma_{n,l}$  шаг за шагом, согласно описанному алгоритму, до шага когда, в процессе построения, величина площади конструируемой поверхности достигает  $(n-1)$ . В результате, мы получим поверхность того же топологического типа, что и поверхности из класса  $\sum_{n,l}$  и при этом у неё будет одно квадратное отверстие с единичной площадью. Полученная, таким образом поверхность сопоставляется поверхности  $\sum(G)$ , которая получается из неё однозначно приклеиванием квадрата, недостающего до её замкнутости. При этом, из процесса построения, следует, что различным поверхностям  $\sum(G_1)$  и  $\sum(G_2)$  с  $G_1 \neq G_2$ ,  $G_1, G_2 \in \Gamma_{n,l}$  соответствуют различные поверхности  $\sum_1$  и  $\sum_2$  из  $\sum_{n,l}$ .

Таким образом, доказано, что имеется инъекция класса  $\Gamma_{n,l}$  в класс  $\sum_{n,l}$ . Следовательно,  $|\Gamma_{n,l}| < |\sum_{n,l}|$  и, поэтому,  $|\Gamma_{n,l}| \leq 3^{(n-2)}$ . Эта оценка не зависит от  $l$ . Тогда, из (3) следует, что  $|\Gamma_{n,l}| \leq 3^{(n-2)}(n+1) = 3^{(n-2)}(n-2)/4$ .

#### Литература

1. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты. – М.: Мир. – 1971. – 368 с.
2. Меньшиков М.В., Молчанов С.А., Сидоренко А.Ф., Теория перколяции и некоторые приложения, в кн. Итоги науки и техники. сер. теор. вер., мат. стат. и теор. кибер., т.24. –ВНИИТИ: Москва, 1986. – С.53-110.
3. Peierls R. On Ising's Model in Ferromagnetism // Proc.Camb.Phil.Soc. – 1936. – 32. – С.477-481.
4. Добрушин Р.Л. Существование фазового перехода в двумерной и трёхмерной моделях Изинга // Теория вероятностей и её применения. – 1965. – 10. – С. 209-230.

## THE ESTIMATION OF THE NUMBER OF BOUNDED FULL CLUSTERS WITH THE FIXED VERTEX ON THE CUBIC LATTICE

E.S. Antonova, Yu.P. Virchenko

Belgorod, BelSU; antonova\_e\_s@mail.ru; virch@bsu.edu.ru

The upper estimation of the number of bounded polyhedrons having the fixed surface area is done. These polyhedrons have no some internal cavities. They are combined on the basis of elementary crystal cells of simple cubic lattice and they contain a fixed vertex in them. This number plays great role in statistical mechanics of lattice systems and in discrete percolation theory. The estimation obtained is analogous to known estimation of the number of bounded cycles having fixed length without self-intersections on square lattice.

**Key words:** cubic lattice, bounded cluster, high estimation