ЛЕКЦИИ 2–3

Краткое содержание. Статсумма модели Поттса.

Пусть G — конечный неориентированный граф (петли и параллельные ребра разрешаются), $V(G)$ и $E(G)$ — соответственно, множества его вершин и ребер, q — натуральное число, v — формальная переменная. Пусть f — произвольное отображение $V(G) \to \{1, \dots, q\}$ (т.е. “раскраска” вершин графа в q цветов), и $m(f)$ — количество ребер $(ab) \in E(G)$ таких, что $f(a) = f(b)$. Функцией Поттса графа G называется величина $Z_G(q, v) = \sum_f v^{m(f)}$.

Пример 1. Пусть G — граф с n вершинами и без ребер. Тогда $m(f) = 0$ для любого f, и $Z_G(q, v) = q^n$.

Пример 2. Пусть G — вершины a и b, совединенные ребром. Тогда существует q отображений $f : \{a, b\} \to \{1, \dots, q\}$ таких, что $f(a) = f(b)$ и $q(q-1)$ отображений $f : \{a, b\} \to \{1, \dots, q\}$ таких, что $f(a) \neq f(b)$. Таким образом, $Z_G(q, v) = q(q-1) + qv$.

Пусть $e \in E(G)$ — ребро графа G. Обозначим $G \setminus e$ граф, полученный из G удалением ребра e, а G/e — граф, полученный стягиванием ребра e. Оба графа содержат на одно ребро меньше, чем G; если e не является петлей, то граф G/e содержит также и на одну вершину меньше.

Теорема 1. *Функция Поттса удовлетворяет тождеству $Z_G(q, v) = Z_{G\setminus e}(q, v) + (v-1)Z_{G/e}(q, v)$. Если e — петля, то $Z_{G\setminus e}(q, v) = Z_{G/e}(q, v)$ и, следовательно, $Z_G(q, v) = vZ_{G\setminus e}(q, v)$. Если ребро e — перешеек (т.е. граф $G \setminus e$ содержит больше компонента связности, чем G), то $Z_{G\setminus e}(q, v) = qZ_{G/e}(q, v)$, так что $Z_G(q, v) = (q + v - 1)Z_{G/e}(q, v)$.*

Доказательство. Пусть a и b — концы ребра e. Разобьем множество отображений $M(G) \stackrel{\text{def}}{=} \{f : V(G) \to \{1, \dots, q\}\}$ на два подмножества: $M_=(G) = \{f \mid f(a) = f(b)\}$ и $M_{\neq}(G) = \{f \mid f(a) \neq f(b)\}$. Очевидно, $Z_G(q, v) = \sum_{f\in M_=(G)} q^{m(f)} + \sum_{f\in M_{\neq}(G)} q^{m(f)}$, а первое слагаемое равно $vZ_{G/e}(q, v)$. С другой стороны, $Z_{G\setminus e}(q, v) = \sum_{f\in M_=(G\setminus e)} q^{m(f)} + \sum_{f\in M_{\neq}(G\setminus e)} q^{m(f)}$; здесь первое слагаемое равно $Z_{G/e}(q, v)$, а второе равно второму слагаемому в формуле для $Z_G(q, v)$. Следовательно, $Z_G(q, v) = vZ_{G/e}(q, v) + Z_{G\setminus e}(q, v) - Z_{G/e}(q, v) = Z_{G\setminus e}(q, v) + (v-1)Z_{G/e}(q, v)$.

Второе утверждение очевидно: если e — петля, то графы $G \setminus e$ и G/e одинаковы.

Для доказательства третьего утверждения построим отображение из множества $M_{G\setminus e} = \{f : V(G \setminus e) \to \{1, \dots, q\}\}$ раскрасок вершин графа $G\setminus e$ в соответствующее множество $M_{G/e}$ раскрасок графа G/e. Пусть a и b — концы ребра e; обозначим G_b компоненту связности графа $G\setminus e$, содержащую вершину b, а $G_a = (G\setminus e)\setminus G_b$ — объединение остальных компонент. Вершины графа G/e — это все вершины $G \setminus e$, кроме a и b, плюс новая вершина x, полученная слиянием a и b. Сопоставим теперь раскраске $f \in M_{G\setminus e}$ раскраску $\Phi(f) \in M_{G/e}$ по следующему правилу:

$$\Phi(f)(c) = \begin{cases} f(c) & c \in G_a, \\ f(a), & c = x, \\ f(c) + f(b) - f(a) \bmod q, & c \in G_b. \end{cases}$$

Как нетрудно видеть, $m(f) = m(\Phi(f))$, и для каждой раскраски $\psi \in M_{G/e}$ существует ровно q раскрасок $f \in M_{G\setminus e}$ таких, что $\psi = \Phi(f)$ (различные f отличаются значением $f(b)$). Отсюда вытекает третье утверждение теоремы. □

Следствие 1. *Функция Поттса является многочленом от q и v; степень многочлена по q равна количеству вершин $n = \#V(G)$ в графе G, а степень по v — количеству ребер $m = \#E(G)$.*

Доказательство. Докажем теорему индукцией по количеству ребер графа G, не являющихся петлями. Если таких ребер нет, и граф G содержит n вершин и m ребер-петель, то $Z_G(q, v) = q^n v^m$, так что утверждение теоремы выполнено. Если же e — ребро, не являющееся петлей, то графы $G \setminus e$ и G/e содержат меньше ребер, не являющихся петлями, чем G. Тем самым по предположению индукции утверждение выполнено для $Z_{G\setminus e}(q, v)$ и $Z_{G/e}(q, v)$; теперь из теоремы следует, что $Z_G(q, v)$ — многочлен.

По предположению индукции степень многочлена $Z_{G/e}(q, v)$ по v равна $m-1$. Старший по v член $Z_{G/e}(q, v)$ имеет вид $A(q)v^{m-1}$, где $A(q)$ — ненулевой многочлен, а все остальные члены содержат v в степени, меньшей $m-1$. Степень по v многочлена $Z_{G\setminus e}(q, v)$ равна $m-1$. Тем самым старший по v член $Z_G(q, v)$ имеет вид $A(q)v^m$, и степень $Z_G(q, v)$ по v равна m. Аналогично, по предположению индукции старший по q член многочлена $Z_{G\setminus e}(q,v)$ имеет вид $q^n B(v)$, а степень многочлдена $Z_{G/e}(q,v)$ по q равна $n-1$. Тем самым $q^n B(v)$ является старшим по q членом также и $Z_G(q,v)$, и его степень по q равна n. $\square$

Для произвольного $f : V(G) \to \{1,\dots,q\}$ обозначим $\Gamma(f)$ подграф графа G, в который входят ровно те ребра $e=(ab)$, для которых $f(a)=f(b)$. Такой подграф является транзитивным: если он содержит ребра (ab) и (bc), то он содержит и ребро (ac) (в предположении, конечно, что в графе G имеется такое ребро); любой транзитивный подграф $\Gamma \subset G$ является $\Gamma(f)$ для некоторого f.

Перепишем теперь определение многочлена Поттса в следующем виде: $Z(q,v) = \sum_f \prod_{(ab)\in E(G)}(1+(v-1)\delta(f(a),f(b)))$, где δ — символ Кронекера: $\delta(x,y)=1$ при $x=y$ и $\delta(x,y)=0$ при $x\neq y$. Теперь имеем

$$\begin{aligned}Z(q,v) = \sum_f \sum_{\Gamma\subset\Gamma(f)} (v-1)^{\#E(\Gamma)} &= \sum_{\Lambda\subset E(G)\text{ транзитивен}} \#\{f \mid \Gamma(f)=\Lambda\} \sum_{\Gamma\subset\Lambda}(v-1)^{\#E(\Gamma)} = \\ &= \sum_{\Gamma\subset E(G)} (v-1)^{\#E(\Gamma)} \#\{f \mid f \text{ постоянен на каждой компоненте связности } \Gamma\} = \\ &= \sum_{\Gamma\subset E(G)} q^{\beta_0(\Gamma)}(v-1)^{\#E(\Gamma)};\end{aligned}$$

здесь $\beta_0(\Gamma)$ — количество компонент связности графа Γ (его 0-е число Бетти).

Пусть S — конечное или счетное множество, называемое множеством состояний системы, а $E : S \to \mathbb{R}$ — функция; $E(\sigma)$ называется энергией состояния $\sigma \in S$. *Статсуммой* системы называется функция $Z(\beta) = \sum_{\sigma\in S} e^{-\beta E(\sigma)}$. В статистической физике считается, что вероятность того, что система пребывает в состоянии σ, равна $e^{-\beta E(\sigma)}/Z(\beta)$; параметр $T \stackrel{\text{def}}{=} 1/\beta$ называется температурой системы (измеренной в специальных единицах). Для произвольной функции $f : S \to \mathbb{R}$ ее среднее значение равно $\langle f\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{Z(\beta)}\sum_{\sigma\in S} f(\sigma)e^{-\beta E(\sigma)}$; например, $\langle E\rangle = \frac{1}{Z(\beta)}\sum_{\sigma\in S} E(\sigma)e^{-\beta E(\sigma)} = -\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} = -\frac{d}{d\beta}\ln Z(\beta)$.

В физике твердого тела рассматривают следующую модель ферромагнитного кристалла. Пусть в каждой вершине графа G (который на практике представляет собой кристаллическую решетку — разную для разных кристаллов) помещена частица, находящаяся в одном из $q \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ состояний (значений спина). Если две частицы находятся в соседних вершинах (т.е. вершинах, соединенных ребром) и имеют одно и то же значение спина, то они взаимодействуют, и этому взаимодействию соответствует потенциальная энергия J. Частицы с различными спинами не взаимодействуют (причины этого см. в любом курсе квантовой механики); если вершины не соединены ребром, то частицы в этих вершинах тоже не взаимодействуют, независимо от спинов (модель "близкодействия"; в реальных кристаллах частицы, расположенные не в соседних ячейках, находятся слишком далеко друг от друга, так что энергией их взаимодействия можно пренебречь).

Теперь состояние такой системы — набор спинов частиц, то есть отображение $f : V \to \{1,\dots,q\}$. Энергия такого отображения равна $Jm(f)$, где, напомним, $m(f)$ — количество ребер (ab) графа G таких, что $f(a)=f(b)$. Теперь статсумма равна $Z_G(\beta) = \sum_f e^{-\beta J m(f)} = \sum_f v^{m(f)} = Z(q,v)$, где $v = e^{-\beta J}$.

Обозначим $n(G) \stackrel{\text{def}}{=} \#V(G)$ количество вершин и $k(G) \stackrel{\text{def}}{=} \beta_0(G)$ — количество компонент связности графа G. *Многочленом Татта* графа G называется функция

$$T_G(x,y) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{(x-1)^{k(G)}(y-1)^{n(G)}} Z_G((x-1)(y-1),y)$$

Теорема 2. *Многочлен Татта графа действительно является многочленом и обладает следующими свойствами:*

$$T_G(x,y) = \begin{cases} xT_{G/e}(x,y), & \text{если } e \text{ — перешеек},\\ yT_{G/e}(x,y), & \text{если } e \text{ — петля},\\ T_{G\setminus e}(x,y)+T_{G/e}(x,y) & \text{в остальных случаях.}\end{cases} \tag{1}$$

Доказательство. Докажем вначале формулы (1). Пусть e — перешеек; тогда $\#V(G/e) = \#V(G)-1 = n-1$ и $\beta_0(G/e) = \beta_0(G) = k$. Теперь из третьего утверждения теоремы 1 вытекает, что

$$\begin{aligned}T_G(x,y) &= \frac{1}{(x-1)^k(y-1)^n} Z_G((x-1)(y-1),y) = \\ &= \frac{(x-1)(y-1)+y-1}{y-1}\frac{1}{(x-1)^k(y-1)^{n-1}} Z_{G/e}((x-1)(y-1),y) = xT_{G/e}(x,y).\end{aligned}$$

Пусть e — петля; тогда $\#V(G/e) = \#V(G) = n$ и $\beta_0(G/e) = \beta_0(G) = k$. Из второго утверждения теоремы 1 вытекает, что

$$T_G(x,y) = \frac{1}{(x-1)^k(y-1)^n} Z_G((x-1)(y-1),y) = y\frac{1}{(x-1)^k(y-1)^n} Z_{G/e}((x-1)(y-1),y) = yT_{G/e}(x,y).$$

В общем случае e не является петлей, так что $\#V(G \setminus e) = n$ и $\#V(G/e) = n-1$. Также e не является перешейком, так что $\beta_0(G/e) = \beta_0(G \setminus e) = \beta_0(G) = k$. Из первого утверждения теоремы 1 вытекает теперь, что

$$\begin{aligned} T_G(x,y) = \frac{1}{(x-1)^k(y-1)^n} Z_G((x-1)(y-1),y) = \\ = \frac{1}{(x-1)^k(y-1)^n} Z_{G\setminus e}((x-1)(y-1),y) + \frac{y-1}{(x-1)^k(y-1)^n} Z_{G/e}((x-1)(y-1),y) = \\ = T_{G\setminus e}(x,y) + T_{G/e}(x,y). \end{aligned}$$

Полиномиальность T_G выводится из формул (1) индукцией по числу ребер. Базу индукции составлет очевидное утверждение $T_G(x,y) = 1$, если граф G не имеет ребер. Шаг индукции делается аналогично теореме 1. □

Некоторые специализации многочлена Поттса (и многочлена Татта) имеют самостоятельный смысл:

Пример 3. Согласно определению функции Поттса, число $Z_G(q,0) = (-1)^{n+k} q^k T_G(q-1,0)$ при целом положительном q равно количеству раскрасок вершин графа G в q цветов так, что вершины, соединенные ребром, окрашены в различные цвета. Эта величина называется хроматическим многочленом графа G.

Пример 4. Величина $s^{n-k}T_G(1+1/s,1)$ — многочлен по s вида $F_G(s) = \sum_{i=0}^{n-k} F_i(G)s^i$, где $F_i(G)$ — количество остовных лесов графа G, содержащих ровно i ребер (и, соответственно, $n-i$ компонент связности). Доказательство проводится индукцией по числу ребер в графе G.

Во-первых, если G не содержит ребер, то $T_G(x,y) = 1$ и $k = n$, откуда $F_G(s) = 1$, и теорема верна.

Во-вторых, пусть e — петля в G. Тогда количество вершин и колиество компонент связности в графах G и G/e одинаково, а их многочлены Татта связаны равенством $T_G(x,y) = yT_{G/e}(x,y)$. Отсюда вытекает, что $F_G(s) = s^{n-k}T_G(1+1/s,1) = s^{n-k}T_{G/e}(1+1/s,1) = F_{G/e}(s)$. Поскольку граф G/e содержит меньше ребер, чем G, для него теорема верна: $F_G(s) = F_{G/e}(s) = \sum_i F_i(G/e)s^i$. Из очевидного равенства $F_i(G) = F_i(G/e)$ (остовный лес не может содержать петлю e) получаем утверждение теоремы.

Пусть теперь e — перешеек в G. Остовный лес в G после стягивания ребра e переходит в остовный лес в G/e и наоборот, всякий остовный лес с i ребрами в G/e получается стягиванием ребра e в двух остовных лесах в G: один содержит ребро e и состоит из $i+1$ ребер, а второй не содержит e и состоит из i ребер. Следовательно, $F_i(G/e) = F_i(G) + F_{i+1}(G)$. С другой стороны, $F(G) = s^{n-k}T_G(1+1/s,1) = (1+1/s)s \cdot s^{n-1-k}T_{G/e}(1+1/s,1) = (s+1)T_{G/e}(1+1/s,1) = (s+1)\sum_i F_i(G/e)s^i$ (по предположению индукции) $= \sum_i (F_i(G/e) + F_{i-1}(G/e))s^i = \sum_i F_i(G)s^i$.

В общем случае пусть e — ребро, не являющееся ни петлей, ни перешейком. В этом случае все остовные леса из i ребер в графе G делятся на две группы: содержащие ребро e и не содержащие. Леса второй группы находятся во взаимно однозначном соответствии с лесами из i ребер в графе $G \setminus e$, а леса первой группы — с остовными лесами из $(i-1)$ ребер в графе G/e. Отсюда $F_i(G) = F_i(G \setminus e) + F_{i-1}(G/e)$. С другой стороны, $F_G(s) = s^{n-k}T_G(1+1/s,1) = s^{n-k}T_{G\setminus e}(1+1/s,1) + s \cdot s^{n-1-k}T_{G/e}(1+1/s,1) = F_{G\setminus e}(s) + sF_{G/e}(s) = \sum_i (F_i(G \setminus e) + F_{i-1}(G/e))s^i$, откуда и вытекает доказываемое утверждение.

В доказанном равенстве возможна дальнейшая специализация. Полагая $s = 1$, получим, что общее число остовных лесов в графе G равно $T_G(2,1)$. Если граф G связный, то коэффициент при s^{n-1} в многочлене F_G равен количеству остовных *деревьев* в G. Поскольку этот коэффициент — старший, получаем, что количество остовных деревьев в G равно $\lim_{s\to\infty} F_G(s)/s^{n-1} = T_G(1,1)$.

Пример 5. Пусть граф G связен. Тогда величина $s^{n-1}T_G(1,1+s)$ — многочлен по s вида $C_G(s) = \sum_{i=n-1}^{\#E(G)} C_i(G)s^i$, где $C_i(G)$ — количество связных подграфов графа G, содержащих i ребер.

Доказательство проводится индукцией по числу ребер, аналогичной примеру 4, и оставляется в качестве упражнения (указание: перешеек принадлежит любомй связному подграфу; наличие или отсутствие петли на связность не влияет).

Полагая $s = 1$, получим, что общее количество связных подграфов связного графа G равно $T_G(1,2)$.

Пример 6. Пусть G — связный граф с $m = \#E(G)$ ребрами, и $0 \le p \le 1$. Граф подвергается следующему случайному преобразованию: каждое из ребер, независимо от других, с вероятностью $1-p$ остается неизменным, а с вероятностью p разрывается (удаляется из графа). Обозначим $R_G(p)$ вероятность того, что получившийся после преобразования граф останется связным. Тогда для $R_G(p)$ имеет место формула $R_G(p) = p^{m-n+1}(1-p)^{n-1}T_G(1,1/p)$.

Для доказательства рассмотрим ребро $e \in G$, и пусть вначале это не петля и не перешеек. Тогда условная вероятность того, что граф останется связным, *при условии, что e разорвано*, равна $R_{G\setminus e}(p)$, а условная вероятность *при условии, что e сохраняется*, равна $R_{G/e}(p)$. Из формулы полной вероятности получается тогда, что $R_G(p) = pR_{G\setminus e}(p) + (1-p)R_{G/e}(p)$. Если e — перешеек, то имеет место та же формула, только граф $G \setminus e$ заведомо несвязный, так что $R_{G\setminus e}(p) = 0$ и $R_G(p) = (1-p)R_{G/e}(p)$. Если e — петля, то ее сохранение или удаление не влияет на связность графа, так что $R_G(p) = R_{G/e}(p)$. Дальнейшее доказательство производится индукцией по числу ребер, аналогичной примерам 4 и 5.

Пример 7. Будем давать ребрам графа G различные ориентации (= ставить на ребрах стрелки); ориентация называется ациклической, если в полученном ориентированном графе отсутствуют ориентированные циклы, т.е. нельзя пройти по стрелкам и вернуться в исходную вершину. Обозначим A_G количество ациклических ориентаций G; так, $A_G = 0$, если в G имеются петли.

Докажем, что количество ациклических ориентаций графа G равно $A_G = T_G(2, 0)$. Пусть, как и раньше, e — ребро графа G. Если ребро e — петля, то $A_G = 0$. Пусть теперь e — перешеек. Тогда через e не проходит ни один цикл в графе G (неориентированный). В этом случае если на всех ребрах графа $G \setminus e$ уже расставлены стрелки, и ориентированного цикла нет, то на ребре e стрелку можно поставить произвольным образом — ориентированный цикл не возникнет. Тем самым, когда e — перешеек, $A_G = 2A_{G\setminus e}$.

Пусть теперь e — не петля и не перешеек; это означает, что в графе G существует путь, соединяющий концы a и b ребра e и не проходящий через e. В этом случае ациклические ориентации графа $G \setminus e$ делятся на два класса. Для ориентаций первого класса имеется путь, соединяющий a и b и такой, что все ребра на этом пути ориентированы в одну и ту же сторону (скажем, от a к b). В этом случае из двух возможных ориентаций ребра e одна приводит к появлению в графе G ориентированного цикла, а другая не приводит. Для ориентаций $G \setminus e$ второго класса на каждом пути, соединяющем a и b, имеются как ребра, ориентированные от a к b, так и ребра с обратной ориентацией. В этом случае обе ориентации ребра e допустимы (не приводят к появлению ориентированного цикла в G).

Очевидно, если в $G \setminus e$ задана ациклическая ориентация второго класса, то если восстановить ребро e и стянуть его, то получится ациклическая ориентация графа G/e; обратно, из каждой ациклической ориентации G/e можно получить ациклическую ориентацию $G \setminus e$ второго класса. Следовательно, количество ациклических ориентаций $G \setminus e$ второго класса равно $A_{G/e}$, первого класса — $A_{G\setminus e} - A_{G/e}$, откуда вытекает равенство (для ребра e — не петли и не перешейка) $A_G = A_{G\setminus e} - A_{G/e} + 2A_{G/e} = A_{G\setminus e} + A_{G/e}$.

Дальнейшее доказательство равенства $A_G = T_G(2, 0)$ производится индукцией по числу ребер аналогично примеру 4.

Пример 8. $T_G(0, 2)$ равно числу вполне циклических ориентаций графа G, то есть таких способов расставить стрелки на ребрах, что каждое ребро входит в ориентированный цикл.

Пример 9. $T_G(1, 0)$ равно числу ациклических ориентаций графа G, имеющих ровно одну вершину-источник, то есть вершину, в которую не входит ни одна стрелка.

Упражнения

Упражнение 2.1. Докажите утверждения примеров 8 и 9.

Упражнение 2.2. Докажите, что $T_G(-1, -1)$ для произвольного графа G является, с точностью до знака, степенью двойки. Чему равен показатель степени?

Ситуация $q = 2$ называется моделью Изинга. В этом случае удобнее считать, что спин $f(i)$ атома в вершине i принимает значения 1 и -1 (традиционно — $1/2$ и $-1/2$, но нам это не важно). При наличии внешнего магнитного поля h атом взаимодействует с ним, так что энергия состояния теперь задается формулой $E(f) = J \sum_{(ab)\in E(G)} \delta(f(a), f(b)) + h \sum_{c\in V(G)} f(c)$.

Упражнение 2.3. Выведите формулу, связывающую статистическую сумму $M_G(\beta, J, h) = \sum_f e^{-\beta E(f)}$ с многочленом Поттса $Z_G(2, v)$.

Упражнение 2.4. Для графа-цепочки, состоящего из n вершин $0, 1, \dots, n-1$, последовательно соединенных ребрами, найдите а) $Z_G(q, \beta)$, б) $M_G(\beta, J, h)$, в) среднее значение $\langle E \rangle$ энергии (в модели Изинга с магнитным полем h), г) среднее значение $\langle f(k) \rangle$ спина в данной вершине $k \in \{0, \dots, n-1\}$ (в той же модели). Исследуйте поведение всех этих величин при $T \to +0$ и $T \to +\infty$ ($\beta \to +\infty$ и $\beta \to +0$ соответственно), а также при $h \to 0$. д) Вычислите *среднюю спонтанную намагниченность* в данной вершине k, т.е. величину $\mathcal{M} = \lim_{h\to+0} \lim_{n\to\infty} \langle f(k) \rangle$.

Из соображений симметрии понятно, что $\langle f(k) \rangle$ при фиксированном n зависит от h нечетно, и поэтому стремится к нулю при $h \to 0$. В то же время ответ в упражнении 2.4д не равен нулю. Это явление называется ферромагнетизмом.