
Наш семинар: математические сюжеты

Многочлен Татта и модель случайных кластеров

Ю.М.Бурман

1. ВВЕДЕНИЕ: РАЗНЫЕ ПРИМЕРЫ

1.1. ХРОМАТИЧЕСКИЙ МНОГОЧЛЕН

Пусть G — конечный граф, вершины которого перенумерованы числами от 1 до n . Мы будем раскрашивать вершины графа в k различных цветов; раскраску назовем правильной, если две вершины, соединенные ребром, раскрашены по-разному. Количество правильных раскрасок графа G в k цветов обозначим $C_G(k)$.

В этом разделе, как и в дальнейшем, мы разрешаем графу иметь кратные ребра (т.е. одну и ту же пару вершин может соединять несколько ребер), а также петли — ребра, начинающиеся и кончающиеся в одной и той же вершине. Нетрудно, однако, заметить, что если заменить какое-нибудь кратное ребро графа на одиночное, величина $C_G(k)$ не изменится, а если в графе имеется петля, то правильных раскрасок не существует, и $C_G(k) = 0$ для любого k . Заметим также, что если граф G состоит из двух кусков — G_1 и G_2 , между которыми ребер нет (мы записываем это как $G = G_1 \sqcup G_2$), то $C_G(k) = C_{G_1}(k)C_{G_2}(k)$.

ПРИМЕР 1. Пусть граф G — дерево из n вершин (и $(n - 1)$ ребер). Тогда его вершины можно красить последовательно: начать с произвольной вершины — ее можно окрасить в любой из k цветов. Затем выбрать цвета вершин, соединенных с начальной — для каждой из них запрещен в точности 1 цвет — цвет начальной вершины — так что имеется $(k - 1)$ возможностей. Затем перейти к вершинам, соединенным с теми, что были окрашены на втором шаге, и т.д. Поскольку граф — дерево, на каждом

этапе, кроме начального, окрашиваемая вершина будет соседствовать в точности с одной вершиной, окрашенной ранее. Следовательно, общее количество правильных раскрасок не зависит от структуры дерева, а только от количества его вершин, и равно $G_G(k) = k(k-1)^{n-1}$.

ПРИМЕР 2. Для полного графа K_n из n вершин, попарно соединенных ребрами имеем, очевидно, $C_G(k) = k(k-1) \cdot \dots \cdot (k-n+1)$; в частности, $C_G(k) = 0$ при $k < n$.

Выделим теперь в графе G некоторое ребро e , соединяющие вершины i и j , и обозначим $G \setminus e$ граф, полученный разрывом ребра e : вершины те же, что и у графа G , ребро e отсутствует, а остальные ребра — как в G . Правильные раскраски графа $G \setminus e$ в k цветов делятся на два класса: раскраски, в которых цвета вершин i и j совпадают, и раскраски, в которых эти цвета различны. Во втором случае мы можем восстановить ребро e , получив правильную раскраску исходного графа G — следовательно, число правильных раскрасок второго класса равно $C_G(k)$. Что касается раскрасок первого класса, то оно равно $C_{G/e}(k)$, где G/e — граф, полученный из G «стягиванием» ребра e : вершины G/e — это все вершины G , кроме j ; ребро e отсутствует; ребра, соединявшие j с другими вершинами, теперь идут в i , а остальные ребра не меняются. Заметим, что даже если в графе G отсутствовали петли или кратные ребра, они могут появиться в G/e .

Поскольку каждая раскраска вершин графа $G \setminus e$ принадлежит либо к первому, либо ко второму классу, имеет место равенство

$$C_{G \setminus e}(k) = C_G(k) + C_{G/e}(k). \quad (1)$$

Следствием его является такое утверждение:

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. Величина $C_G(k)$ для любого графа G является многочленом от k . Степень многочлена равна числу вершин графа, а старший коэффициент равен 1.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть n — число вершин графа G . Если граф не имеет ребер, то, очевидно, $C_G(k) = k^n$, и утверждение доказано. Дальнейшее доказательство проводится совместной индукцией по числу вершин и ребер. Граф $G \setminus e$ имеет n вершин и меньше ребер, чем G — следовательно, по предположению индукции, $C_{G \setminus e}(k)$ — это многочлен степени n со старшим коэффициентом 1. Граф G/e имеет $(n-1)$ вершин, так что по предположению индукции $C_{G/e}(k)$ — многочлен степени $(n-1)$. Следовательно, $C_G(k) = C_{G \setminus e}(k) - C_{G/e}(k)$ является многочленом степени n со старшим коэффициентом 1.

Многочлен $C_G(k)$ называется *хроматическим многочленом графа*.

ПРИМЕР 3. Пусть $G = Z_n$ — цикл из n вершин. Тогда $G \setminus e$ — цепочка L_n из n вершин, а $G/e = Z_{n-1}$. Согласно формуле (1), $C_{Z_n} = C_{L_n} - C_{Z_{n-1}}$. Цепочка является деревом, откуда $C_{L_n}(k) = k(k-1)^{n-1}$ (в силу примера 1). Следовательно,

$$C_{Z_n} + C_{Z_{n-1}} = k(k-1)^{n-1}. \quad (2)$$

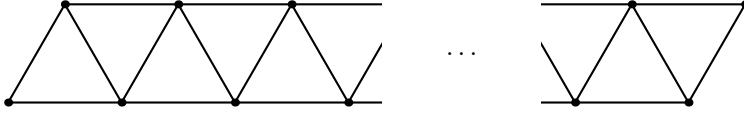
Граф Z_2 является полным графом из 2 вершин (ребро — кратное, но это не влияет на хроматический многочлен), так что

$$C_{Z_2}(k) = k(k-1). \quad (3)$$

Знакопеременная сумма равенств (2) при всех n и равенства (3) дает

$$\begin{aligned} C_{Z_n} &= k(k-1)((k-1)^{n-2} - (k-1)^{n-3} + \dots + (-1)^{n-2}) = \\ &= k(k-1) \frac{(k-1)^{n-1} + (-1)^{n-2}}{(k-1) + 1} = (k-1)((k-1)^{n-1} + (-1)^n). \end{aligned}$$

ЗАДАЧА 1. Найдите $C_G(k)$, если граф G — это а) прямоугольная решетка $2 \times n$, б*) прямоугольная решетка $m \times n$, в) треугольная решетка $2 \times n$, изображенная на рисунке, г*) аналогичная треугольная решетка $m \times n$.



1.2. РАЗРЫВ СЛУЧАЙНЫХ РЕБЕР

Рассмотрим еще раз граф G (который может иметь петли и кратные ребра); на этот раз предположим его связным. Граф подвергается следующему случайному преобразованию: каждое из ребер, независимо от других, с некоторой вероятностью p остается неизменным, а с вероятностью $1 - p$ разрывается (удаляется из графа). Обозначим $R_G(p)$ вероятность того, что получившийся после преобразования граф останется связным.

ПРИМЕР 4. Пусть G — дерево с n вершинами. Тогда оно останется связным только в случае, когда ни одно ребро не будет разорвано. Поскольку число ребер равно $n - 1$, а разрываются они независимо друг от друга, вероятность такого события равна $R_G(p) = p^{n-1}$.

ПРИМЕР 5. Для задачи о разрыве случайных ребер, в отличие от задачи пункта 1.1, кратности ребер существенны. Так, если G — две вершины, соединенные a ребрами, то граф станет несвязным только если все ребра будут разорваны. Отсюда $R_G(p) = 1 - (1 - p)^a$.

Отметим в графе G ребро e . Вероятность того, что после разрыва случайных ребер граф останется связным, *при условии что ребро e будет разорвано*, равна $R_{G \setminus e}(p)$ — вероятности распада на части графа, в котором ребро e стерто заранее. Вероятность того, что граф G останется связным, *при условии что ребро e сохранится*, равна, очевидно, $R_{G/e}(p)$. Вероятность разрыва ребра e равна $(1 - p)$, сохранения — p , поэтому по формуле полной вероятности получаем, что

$$R_G(p) = (1 - p)R_{G \setminus e}(p) + pR_{G/e}(p). \quad (4)$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. *Величина $R_G(p)$ является многочленом от p , степень которого не превосходит числа ребер в графе G , считая с кратностями и не считая петли.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Очевидно, разрыв петли не влияет на связность графа, поэтому можно с самого начала считать, что петель в графе нет. Если в графе 1 вершина (и ребер нет), то $R_G(p) = 1$. Дальнейшее доказательство — индукция по числу ребер (граф $G \setminus e$ имеет на 1 ребро меньше, чем G ; граф G/e — по крайней мере на 1 ребро меньше).

ЗАДАЧА 2. Найдите многочлен $R_G(p)$, где G — графы, упомянутые в задаче 1.

1.3. АЦИКЛИЧЕСКИЕ ОРИЕНТАЦИИ

Пусть G — граф. Мы будем давать ребрам графа 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 графе имеются петли.

ПРИМЕР 6. Если G — дерево с n вершинами (и $(n - 1)$ ребрами), то любая его ориентация является ациклической. Поэтому $A_G = 2^{n-1}$.

Выделим в графе G ребро e . По аналогии с пунктами 1.1 и 1.2 попробуем установить связь между величинами A_G , $A_{G \setminus e}$ и $A_{G/e}$. В данном случае связь зависит от свойств ребра e :

1. Если ребро e — петля, то $A_G = 0$.
2. Пусть ребро e — перешеек. Это означает, что при удалении этого ребра граф распадается: количество компонент связности у графа $G \setminus e$ больше, чем у графа G . Или, что то же самое, через ребро e не проходит ни один цикл в графе G (неориентированный). В этом случае если на всех ребрах графа G , кроме 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,

$$A_G = 2A_{G \setminus e}. \quad (5)$$

3. Пусть теперь e — не петля и не перешеек; это означает, что в графе G существует путь, соединяющий концы i и j ребра e и не проходящий через e . В этом случае ациклические ориентации графа $G \setminus e$ делятся на два класса. Для ориентаций первого класса все ребра на всех путях, соединяющих i и j , ориентированы в одну и ту же сторону. 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 i и j , имеются как ребра, ориентированные от i к j , 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 можно склеить вершины i и j — 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)

$$A_G = A_{G \setminus e} - A_{G/e} + 2A_{G/e} = A_{G \setminus e} + A_{G/e} \quad (6)$$

Равенства (5) и (6) позволяет вычислить A_G любого графа.

ПРИМЕР 7. Пусть $G = Z_n$ — цикл из n вершин и n ребер, $n \geq 2$. Ребра цикла не являются петлями и перешейками; граф $Z_n \setminus e$ является деревом, а $Z_n/e = Z_{n-1}$. Отсюда получаем (при $n \geq 2$) равенство $A_{Z_n} = 2^{n-1} + A_{Z_{n-1}}$. Граф Z_1 содержит петлю, поэтому $A_{Z_1} = 0$, откуда по индукции $A_{Z_n} = 2^n - 2$.

2. Многочлен ТАТТА

2.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ И ПРИМЕРЫ

ОПРЕДЕЛЕНИЕ [1]. *Многочленом Татта* называется функция $G \mapsto T_G(x, y)$ из множества неориентированных графов (возможно, с петлями и кратными ребрами) в множество многочленов от двух переменных, обладающая следующими свойствами:

1. Если граф G не имеет ребер, то $T_G(x, y) = 1$.
2. Если ребро e — не петля и не перешеек, то $T_G(x, y) = T_{G \setminus e}(x, y) + T_{G/e}(x, y)$.

3. Если ребро e — перешеек, то $T_G(x, y) = xT_{G/e}(x, y)$.

4. Если ребро e — петля, то $T_G(x, y) = yT_{G \setminus e}(x, y)$.

Разумеется, существование и единственность многочлена Татта еще нужно доказать. Мы сделаем это позднее (раздел 2.2), а пока выясним, как многочлен Татта связан с теми задачами, которые мы рассматривали до сих пор.

ПРИМЕР 8. Многочлен Татта произвольного дерева с n вершинами (и $(n - 1)$ ребрами) равен x^{n-1} . Это доказывается индукцией по n : в дереве произвольное ребро является перешейком, после стягивания которого получается опять дерево — с $(n - 1)$ вершинами.

ПРИМЕР 9. Пусть $G = Z_n$ — цикл из n вершин. Тогда для произвольного ребра e граф $G \setminus e$ — цепочка L_n из n вершин, а $G/e = Z_{n-1}$. Согласно свойству 2, $T_{Z_n}(x, y) = T_{L_n}(x, y) + T_{Z_{n-1}}(x, y) = x^{n-1} + T_{Z_{n-1}}(x, y)$ по формуле примера 8; это равенство верно при всяком $n > 1$. Граф Z_1 — петля, так что $T_{Z_1} = yT_{\text{точка}} = y$ по свойствам 4 и 1. Следовательно, $T_{Z_{n-1}} = y + x + \dots + x^{n-1}$.

Оказывается, что все комбинаторные характеристики графов, о которых шла речь в разделе 1, выражаются через многочлен Татта.

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Пусть G — граф с n вершинами и k компонентами связности. Тогда его хроматический многочлен выражается формулой $C_G(s) = (-1)^{n+k} s^k T_G(1 - s, 0)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Доказательство проведем индукцией по числу ребер графа G . Если ребер нет вовсе, то $k = n$, $T_G(x, y) \equiv 1$, а $C_G(s) = s^n$ — равенство верно. Пусть теперь в графе имеется ребро e . Для графов $G \setminus e$ и G/e утверждение верно по предположению индукции. Пусть вначале e — не петля и не перешеек. Тогда графы $G \setminus e$ и G/e оба содержат по k компонент связности; количество вершин в $G \setminus e$ равно n , а в G/e — $(n - 1)$. Тогда

$$\begin{aligned} C_G(s) &= C_{G \setminus e}(s) - C_{G/e}(s) = \quad (\text{по формуле (1)}) \\ &= (-1)^{n+k} s^k T_{G \setminus e}(1 - s, 0) - (-1)^{n-1+k} s^k T_{G/e}(1 - s, 0) = \\ &= (-1)^{n+k} s^k (T_{G \setminus e}(1 - s, 0) + T_{G/e}(1 - s, 0)) = \\ &= (-1)^{n+k} s^k T_G(1 - s, 0), \end{aligned}$$

что и требовалось.

Пусть теперь e — перешеек, соединяющий вершины i и j . Тогда граф $G \setminus e$ имеет $(k + 1)$ компонент связности и n вершин. Из всех $C_{G \setminus e}(s)$ его

раскрасок в s цветов ровно для $1/s$ -ой части цвета вершин i и j совпадают. Следовательно,

$$\begin{aligned} C_G(s) &= (1 - 1/s)C_{G \setminus e}(s) = (1 - 1/s)(-1)^{n+k+1}s^{k+1}T_{G \setminus e}(1 - s, 0) = \\ &\quad (\text{по предположению индукции}) \\ &= (1 - 1/s)(-1)^{n+k+1}s^{k+1}(1 - s)T_G(1 - s, 0) = \quad (\text{по свойству 3}) \\ &= (-1)^{n+k}s^kT_G(1 - s, 0). \end{aligned}$$

Если e — петля, то $C_G(s) = 0$. С другой стороны, $T_G(1 - s, 0) = 0 \cdot T_{G/e}(1 - s, 0) = 0$.

Утверждение доказано.

УТВЕРЖДЕНИЕ 4. Пусть G — связный граф. Многочлен $R_G(p)$, определенный в разделе 1.2, задается формулой

$$R_G(p) = (1 - p)^{r-n+k}p^{n-k}T_G(1, \frac{1}{1-p}),$$

где n и k — те же, что и в утверждении 3, а r — число ребер графа.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Опять индукция по числу r ребер графа. Для графа с 1 вершиной без ребер $R_G(p) = 1$ и $T_G(p) = 1$, что соответствует формуле, поскольку в этом случае $r = 0$ и $n = k = 1$.

Выделим в графе ребро e . Если оно не является ни перешейком, ни петлей, то граф $G \setminus e$ имеет n вершин, $(r-1)$ ребер и k компонент связности, а граф G/e — соответственно, $(n-1)$, $(r-1)$ и k . Имеем тогда

$$\begin{aligned} R_G(p) &= (1 - p)R_{G \setminus e}(p) + pR_{G/e}(p) = \quad (\text{по формуле (4)}) \\ &= (1 - p)^{r-n+k}p^{n-k}T_{G \setminus e}(1, \frac{1}{1-p}) + (1 - p)^{r-n+k}p^{n-k}T_{G/e}(1, \frac{1}{1-p}) = \\ &\quad (\text{по предположению индукции}) \\ &= (1 - p)^{r-n+k}p^{n-k}T_G(1, \frac{1}{1-p}) \quad (\text{по свойству 2 многочлена Татта}). \end{aligned}$$

Если ребро e — перешеек, то $R_G(p) = pR_{G/e}(p)$. По предположению индукции,

$$pR_{G/e}(p) = (1 - p)^{r-n+k}p^{n-k}T_{G/e}(1, \frac{1}{1-p}) = (1 - p)^{r-n+k}p^{n-k}T_G(1, \frac{1}{1-p})$$

(по свойству 3 многочлена Татта).

Если ребро e — петля, то $R_G(p) = R_{G \setminus e}(p)$. По предположению индукции,

$$R_{G \setminus e}(p) = (1 - p)^{r-1-n+k}p^{n-k}T_{G \setminus e}(1, \frac{1}{1-p}) = (1 - p)^{r-n+k}p^{n-k}T_G(1, \frac{1}{1-p})$$

(по свойству 4 многочлена Татта).

УТВЕРЖДЕНИЕ 5. *Количество ациклических ориентаций графа G равно $A_G = T_G(2, 0)$.*

Доказательство — стандартная индукция по числу ребер графа с использованием свойств величины A_G , доказанных в разделе 1.3.

2.2. СУЩЕСТВОВАНИЕ И ЕДИНСТВЕННОСТЬ

Для доказательства существования и единственности мы определим сначала для каждого графа G вспомогательный многочлен $Z(q, v)$ от двух переменных. Он задается формулой

$$Z_G(q, v) = \sum_H q^{k(H)} v^{e(H)}, \quad (7)$$

где сумма берется по всем подграфам H графа G , множество вершин которых совпадает с множеством вершин G , а множество ребер — любое подмножество множества ребер G (так что всякий H имеет, в обозначениях предыдущего раздела, ровно n вершин и не более r ребер). В формуле (7) $k(H)$ обозначает количество компонент связности графа H , а $e(H)$ — число ребер.

Оказывается, многочлен Z_G хорошо ведет себя при разрывах и стягивании ребер: для произвольного ребра e графа G имеет место формула

$$Z_G(q, v) = Z_{G \setminus e}(q, v) + v Z_{G/e}(q, v). \quad (8)$$

Действительно, все подграфы H графа G можно разделить на два непересекающихся класса: содержащие ребро e и не содержащие его. Подграф второго класса — это просто подграф в $G \setminus e$, так что сумма $\sum_H q^{k(H)} v^{e(H)}$, взятая по подграфам второго класса, равна $Z_{G \setminus e}(q, v)$. Во всяком подграфе первого класса можно стянуть ребро e , получив подграф графа G/e . Поскольку при стягивании число ребер уменьшается на единицу, сумма $\sum_H q^{k(H)} v^{e(H)}$, взятая по подграфам первого класса, равна $v Z_{G/e}(q, v)$.

Формула (8) верна для любого ребра e . В случае, если ребро e — петля, то графы $G \setminus e$ и G/e совпадают, что дает равенство

$$Z_G(q, v) = (1 + v) Z_{G \setminus e}(q, v). \quad (9)$$

Пусть теперь e — перешеек. Всякому подграфу H графа G/e можно сопоставить два подграфа графа G : один из них, H_1 содержит все ребра H и еще ребро e , а второй, H_2 — все ребра H , но ребро e не содержит. Очевидно, $e(H_1) = e(H) + 1$, $k(H_1) = k(H)$, и $e(H_2) = e(H)$ и $k(H_2) = k(H) + 1$. Отсюда следует, что $q^{k(H_1)} v^{e(H_1)} + q^{k(H_2)} v^{e(H_2)} = (q + v) q^{k(H)} v^{e(H)}$, то есть

$$Z_G(q, v) = (q + v) Z_{G/e}(q, v). \quad (10)$$

ПРИМЕР 10. Пусть граф G — дерево с n вершинами (и $(n - 1)$ ребрами). Поскольку каждое ребро дерева является перешейком, из формулы

(10) вытекает, что $Z_G = (q + v)^{n-1} Z_{\text{точка}}$. Очевидно, $Z_{\text{точка}} = q$, откуда $Z_G = q(q + v)^{n-1}$.

Теперь мы можем выразить многочлен Татта графа G через многочлен Z_G , доказав тем самым теорему существования и единственности:

ТЕОРЕМА 1. *Для всякого графа G многочлен Татта $T_G(x, y)$ существует, единствен и задается формулой*

$$T_G(x, y) = \frac{1}{(x-1)^k (y-1)^n} Z_G((x-1)(y-1), y-1), \quad (11)$$

где n — число вершин, а k — количество компонент связности графа.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Покажем, что величина в правой части равенства (11) обладает всеми свойствами многочлена Татта. Если G — граф с n вершинами и без ребер, то его единственный подграф — он сам, так что $Z_G(q, v) = q^n$. Поскольку $k = n$, имеем

$$\frac{1}{(x-1)^k (y-1)^n} Z_G((x-1)(y-1), y-1) = 1,$$

как и требуется (свойство 1). Свойства 2, 3 и 4 легко выводятся из формул (8), (10) и (9) соответственно. Несложной индукцией по числу ребер отсюда выводится, что величина $\frac{1}{(x-1)^k (y-1)^n} Z_G((x-1)(y-1), y-1)$ — многочлен от x и y . Тем самым доказано существование многочлена Татта и формула (11).

Единственность многочлена Татта доказывается независимо от формулы (11) индукцией по числу ребер. Действительно, если ребер нет (база индукции), то $T_G(x, y) = 1$ по свойству 1. Если же имеется ребро e , то вычисление T_G однозначно сводится с помощью свойства 2, 3 или 4 к вычислению многочлена Татта для графов $G \setminus e$ и G/e , имеющих на одно ребро меньше.

2.3. ДРУГИЕ СПЕЦИАЛИЗАЦИИ МНОГОЧЛЕНА ТАТТА

Подставляя различные величины вместо x и y в многочлен Татта $T_G(x, y)$, можно получить описание многих комбинаторных свойств графа G . С некоторыми примерами мы уже познакомились в разделе 2.1; вот еще несколько утверждений такого же рода (заимствованных из замечательного обзора [2]):

1. Если граф G связный, то $T_G(1, 1)$ равно числу подграфов-деревьев в G .
2. Пусть G — связный граф, и $f_i(G)$ — количество его подграфов-лесов с ровно i ребрами (лес — это граф без циклов, не обязательно связный). Тогда имеет место равенство $\sum_{i=0}^{n-1} f_i(G) s^i = s^{n-1} T_G(1 + 1/s, 1)$;

здесь n — количество вершин в графе G (следовательно, подграф-лес содержит от 0 до $(n-1)$ ребер). Полагая $s = 1$, получим, что $T_G(2, 1)$ равно общему числу подграфов-лесов в G .

3. Пусть G — связный граф, и $c_i(G)$ — количество его связных подграфов с i ребрами. Тогда

$$\sum_{i=0}^{r-n+1} c_i(G) s^i = s^{r-n+1} T_G(1, 1 + \frac{1}{s}),$$

где r — количество ребер, а n — количество вершин графа G . Полагая $s = 1$, получим, что $T_G(1, 2)$ равно числу связных подграфов в G .

4. $T_G(0, 2)$ равно числу вполне циклических ориентаций графа G , то есть таких способов расставить стрелки на ребрах, что каждое ребро входит в ориентированный цикл.
5. $T_G(1, 0)$ равно числу ациклических ориентаций графа G (ср. утверждение 5), имеющих ровно одну вершину-источник, то есть вершину, в которую не входит ни одна стрелка.
6. $T_G(-1, -1) = (-1)^r 2^d$, где r — число ребер графа, а d — размерность так называемого «велосипедного пространства» графа, см. определение в работе [3].

Доказательства всех этих свойств похожи на доказательства утверждений 3–5 и оставляются читателю в качестве упражнения.

3. МОДЕЛЬ СЛУЧАЙНЫХ КЛАСТЕРОВ

«Вспомогательный многочлен» $Z_G(q, v)$, определенный формулой (7), имеет неожиданное применение в математической физике: он описывает статистическую сумму простейшей модели кристалла-магнетика — *модели случайных кластеров*.

Кристалл в этой модели изображается графом (обычно решеткой, типа рассмотренных в задаче 1). Атомы — вершины графа, и каждая вершина соединена ребрами с несколькими другими — «ближайшими соседями». Каждый атом может находиться в одном из q состояний (значений спина), так что состояние всего кристалла описывается парой (G, σ) , где $\sigma : V(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, q\}$ — функция на множестве вершин графа G (ср. с разделом 1.1).

Атомы кристалла взаимодействуют между собой, и этому взаимодействию отвечает некоторая потенциальная энергия. Взаимодействие зависит от состояния атомов и от их расположения. В модели случайных кластеров предполагается, что атом взаимодействует только со своими

ближайшими соседями (т. е. вершина — с вершинами, соединенными с нею ребрами), и только в том случае, когда значения их спинов совпадают. Тем самым каждому ребру e графа G с концами $e^+, e^- \in V(G)$ отвечает потенциальная энергия, равная $J_e \delta(\sigma(e^+), \sigma(e^-))$. Здесь J_e — константа, характеризующая интенсивность связи вдоль данного ребра, а $\delta(a, b) = 1$, если $a = b$, и 0, если $a \neq b$. Потенциальная энергия всего кристалла в состоянии, характеризуемом парой (V, σ) , складывается из энергий попарных взаимодействий:

$$\Pi(G, \sigma) = \sum_{e \in E(G)} J_e \delta(\sigma(e^+), \sigma(e^-)). \quad (12)$$

Под влиянием теплового движения кристалл случайным образом переходит из одного состояния в другое. В классической статистической физике принят постулат Больцмана, согласно которому вероятность для системы находиться в данном состоянии σ равна $P(\sigma) = \exp(-\beta \Pi(\sigma)) / Z(\beta)$, где β связана с (абсолютной) температурой T системы равенством $\beta = 1/kT$ (k — физическая константа, называемая постоянной Больцмана), а $Z(\beta)$ — нормировочный множитель, равный (чтобы сумма всех вероятностей равнялась 1)

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta \Pi(\sigma)),$$

где сумма берется по всем состояниям системы (в нашем случае — по всем функциям $\sigma : V(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, q\}$). Величина $Z(\beta)$ называется *статистической суммой* системы.

Пусть f — некоторая физическая характеристика системы, т. е. функция ее состояния (для определенности, с вещественными значениями). Тогда среднее значение f по всем состояниям системы равно

$$\langle f \rangle = \sum_{\sigma} f(\sigma) P(\sigma) = \sum_{\sigma} f(\sigma) \exp(-\beta \Pi(\sigma)) / Z(\beta).$$

ПРИМЕР 11. Среднее значение энергии произвольной системы равно $\langle \Pi \rangle = \sum_{\sigma} \Pi(\sigma) \exp(-\beta \Pi(\sigma)) / Z(\beta) = -\frac{d}{d\beta} \ln Z(\beta)$.

Мы докажем следующую теорему, впервые полученную П. Кастелейном и С. Фортюэном в 1969 г.:

ТЕОРЕМА 2 ([4]). Пусть $J_e = J$ не зависит от ребра e . Тогда статистическая сумма модели случайных кластеров равна

$$Z_G(q, \exp(-\beta J) - 1),$$

где многочлен Z определен формулой (7).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $\sigma : V(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, q\}$ — состояние системы. Обозначим $v = \exp(-\beta J) - 1$; тогда

$$\begin{aligned} \exp(-\beta \Pi(\sigma)) &= \exp(-\beta J \sum_e \delta(\sigma(e^+), \sigma(e^-))) \\ &= \prod_e \exp(-\beta J \delta(\sigma(e^+), \sigma(e^-))) = \\ &= \prod_e (1 + v \delta(\sigma(e^+), \sigma(e^-))) = \sum_{A \subset G} \prod_{e \in A} v \delta(\sigma(e^+), \sigma(e^-)), \end{aligned}$$

иными словами,

$$\exp(-\beta \Pi(\sigma)) = \sum_{A \subset G} v^{e(A)},$$

где сумма берется по всем подграфам $A \subset G$, для которых значение функции σ одинаково на обоих концах каждого входящего в них ребра. Это означает, что функция σ постоянна на компонентах связности подграфа A . Тем самым статистическая сумма модели случайных кластеров равна

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \exp(-\beta \Pi(\sigma)) &= \\ &= \sum_{A \subset G} v^{e(A)} \times \# \text{ функций } \sigma, \text{ постоянных на компонентах связности } A = \\ &= \sum_{A \subset G} q^{k(A)} v^{e(A)} = Z_G(q, v). \end{aligned}$$

ПРИМЕР 12. Для одномерного кристалла («цепочки») из N атомов, согласно примеру 10, имеем (в предположении, что веса всех ребер одинаковы) $Z(q, v) = q(q+v)^{N-1}$. Отсюда вытекает, что статистическая сумма равна $q(q-1 + \exp(-\beta J))^{N-1}$, а средняя энергия магнитного взаимодействия атомов системы, согласно примеру 11, равна

$$\langle \Pi \rangle = (N-1) \frac{J \exp(-\beta J)}{q-1 + \exp(-\beta J)}.$$

Средняя энергия в расчете на один атом кристалла равна $\langle E \rangle / N$ и в пределе $N \rightarrow \infty$ стремится к $\frac{J \exp(-\beta J)}{q-1 + \exp(-\beta J)}$.

Если температура системы велика ($T \rightarrow +\infty$), то $\beta = 1/kT \rightarrow 0$, и средняя энергия на один атом приближается к J/q . Поведение же системы при низких температурах ($T \rightarrow 0$, то есть $\beta \rightarrow +\infty$) зависит от знака константы взаимодействия J . Если $J > 0$, то $\exp(-\beta J) \rightarrow 0$, и средняя энергия стремится к нулю. Такие кристаллы называются антиферромагнитными: в них соседним атомам энергетически невыгодно иметь одинаковые спины, и поэтому при низкой температуре, когда тепловое

движение практически исчезает, такая ситуация практически не встречается. Если же $J < 0$ (ферромагнитный кристалл), то $\exp(-\beta J) \rightarrow +\infty$, и средняя энергия на один атом стремится к J . Иными словами, в ферромагнитном кристалле при низкой температуре все атомы стараются иметь один и тот же спин.

Пусть теперь $q = 2$, то есть спин σ принимает только 2 значения. Будем считать, что эти значения равны $1/2$ и $-1/2$. Тогда можно рассмотреть функцию состояния системы, равную $f(\sigma) = \sum \sigma(v)$, где сумма берется по всем вершинам графа.

Введем теперь в систему внешнее магнитное поле. Тогда энергия системы складывается из двух слагаемых: энергии $\Pi(\sigma)$ попарного взаимодействия, заданной формулой (12), и энергии взаимодействия спинов с магнитным полем, равной $hf(\sigma)$ (h — величина поля).

ЗАДАЧА 3. Пусть граф $G = G_N$ — цепочка, как в примере 12. а) Вычислите статистическую сумму $Z_N(\beta, h) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta(\Pi(\sigma) + hf(\sigma)))$. б) Вычислите $\langle f \rangle$ как функцию β и h . в) Найдите предел $\lim_{h \rightarrow +0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle f \rangle$.

Предел в пункте 3в называется *спонтанной намагниченностью*. Он не равен нулю, в отличие от предела $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{N} \langle f \rangle$, который равен нулю по соображениям симметрии.

ЗАМЕЧАНИЯ

1. Из утверждений 3 и 4 следует, что задачи 1 и 2 можно решить, если найти многочлены Татта соответствующих графов-решеток. Для решеток $2 \times n$ (пункты 1а и 1в) это несложно, но явная формула для многочлена Татта произвольных решеток (пункты 1б и 1г, отмеченные звездочкой) в настоящее время неизвестна (так же как и формулы для многочленов C_G и R_G). Поиски такой формулы интенсивно ведутся. Задача про треугольную решетку выглядит несколько проще: для нее известен предел многочлена Татта при $n \rightarrow \infty$ (и фиксированном m), а также доказан ряд других результатов, см. статью [5]. Про прямоугольные решетки литература очень велика; см. недавнюю работу [6].

2. Популярный рассказ о кристаллах-магнетиках см. в книге [7]. Особенно интересной оказывается теория, когда в качестве модели магнетика выступает не граф-цепочка, как в примере 12, а двумерная решетка, наподобие рассмотренных в задаче 1. Устремив размеры решетки к бесконечности, можно вычислить, как в задаче 3, спонтанную намагниченность. В данном случае ее зависимость от температуры оказывается негладкой: при температуре ниже некоторого критического уровня T_c

спонтанная намагниченность отлична от нуля, а при $T > T_c$ — равна нулю. Это явление называется фазовым переходом. Точная формула для T_c была найдена Янгом [8]; см. книги [9], [10] и [11]. Отметим еще книгу [12] (вышедшую в той же серии «Библиотечка „Квант“», что и [7]) — в ней разбираются задачи про большие решетки, весьма близкие по духу к упомянутым выше.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Татт У. *Теория графов*. М.: Мир, 1988.
- [2] Welsh D. J. A., Merino C. *The Potts model and the Tutte polynomial* // J. Math. Phys. Vol. 41, no 3, 2000. P. 1127–1152.
- [3] Read R. C., Rosenstiehl P. *On the principal edge tripartition of a graph* // Ann. Discrete Math. Vol. 3, 1978. P. 195–226.
- [4] Kasteleyn P. W., Fortuin C. M. *Phase transitions in lattice systems with random local properties* // J. Phys. Soc. Japan. Vol. 26 (Suppl.), 1969. P. 11–14.
- [5] Chang S.-Ch., Jacobsen J. L., Salas J., Shrock R. *Exact Potts model partition functions for strips of the triangular lattice* // J. Stat. Phys. Vol. 114, no 3/4, 2004. P. 763–823.
- [6] Calkin N. et. al., *Improved bounds for the number of forests and acyclic orientations in the square lattice* // Electronic J. Combin., Vol. 10, 2003.
- [7] Каганов М. И., Цукерник В.М. *Природа магнетизма* (серия «Библиотечка «Квант»», выпуск 16). М.: Наука, 1982.
- [8] Yang C. N. *The simultaneous magnetization of a two-dimensional Ising model* Phys. Rev. B. Vol. 85, 1952. P. 806–816.
- [9] Бэкстер Р. *Точно решаемые модели в статистической механике*. М.: Мир, 1985.
- [10] Белавин А. А., Кулаков А. Г., Устинов Р. А. *Лекции по теоретической физике*. М.: МЦНМО, 2001.
- [11] Джимбо М., Мива Т. *Алгебраический анализ точно решаемых решеточных моделей*. Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика / Удмуртский университет, 2000.
- [12] Эфрос А. Л. *Физика и геометрия беспорядка* (серия «Библиотечка „Квант“», выпуск 19). М.: Наука, 1982.