

Министерство общего и профессионального образования
Российской Федерации
Московский физико-технический институт
(Государственный Университет)

**Дуальность интерфейсов в двумерных
моделях Поттса**

Выпускная квалификационная
работа на степень магистра
студента 428 гр. Зателепина А.В.

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., проф. Щур Л.Н.

Москва, 2010г.

Содержание

1	Введение	2
1.1	Двумерная модель Поттса	2
1.2	Постановка задачи	3
2	Обзор теоретических работ	4
2.1	Дуальность Дюплантье	4
2.2	SLE	5
2.2.1	Эволюция Лёвнера и случайные кривые	6
2.2.2	Требуемые свойства меры	8
2.2.3	Фрактальная размерность и дуальность на языке SLE	9
2.2.4	Идентификация с решёточными моделями для конкретных κ	9
2.3	Проверявшиеся аналитические значения	10
3	Обзор численных исследований	11
4	Алгоритмы	14
4.1	Монте–Карло алгоритмы	14
4.2	Проблема определения границ кластеров	15
4.2.1	Петли на медиальной решётке	16
4.2.2	Топологически нетривиальные границы	17
4.2.3	Алгоритм поиска границ	19
5	Моделирование и результаты	20
5.1	Анализ численных данных	21
5.1.1	Перколяция: $q = 1$	22
5.1.2	$q = 1.5$	23
5.1.3	Модель Изинга: $q = 2$	23
5.1.4	$q = 2.5$	24
5.1.5	$q = 3$	24
5.1.6	$q = 3.5$	25
5.1.7	Логарифмические поправки: $q = 4$	25
5.2	Обсуждение результатов	26
6	Заключение	27

1 Введение

Двумерные статистические системы, такие как перколяция, модель Поттса и другие, могут выступать в качестве моделей реальных физических систем, к тому же их критическое поведение весьма богато и интересно само по себе. Наиболее интересным сегодня объектом в изучении таких систем являются критические интерфейсы. С помощью методов кулоновского газа и конформной теории поля были получены многие точные результаты, касающиеся фрактальных свойств этих объектов. Недавно многие результаты, полученные этими методами, были математически строго доказаны в рамках теории эволюции Шрамма–Лёвнера (SLE). В данной работе проводилась численная проверка некоторых из таких предсказаний.

1.1 Двумерная модель Поттса

Модель Поттса [1] представляет собой обобщение модели Изинга, в которой спины могут принимать не два, а одно из q значений. Обзор основных свойств модели дан в [2].

Итак, в узлах i некоторой решётки заданы переменные спинов $\sigma_i \in \{1, \dots, q\}$, которые взаимодействуют только со своими ближайшими соседями. Гамильтониан системы таков:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1). \quad (1)$$

В ферромагнитной модели все $J_{ij} > 0$. В простейшем случае, который и будет исследоваться в данной работе, все $J_{ij} = J$.

Введём переменные связей b_{ij} , которые определены на парах соседних узлов i и j . Будем считать, что если $b_{ij} = 1$, то связь есть, и будем обозначать это отрезком между узлами i и j . Будем называть *кластером* множество вершин, такое что между любыми двумя вершинами этого множества можно пройти по присутствующим в конфигурации связям.

Оказывается удобным [3] переписать стат. сумму модели так, чтобы

суммирование шло не только по конфигурациям спиновых переменных $\{\sigma_i\}$, но и по конфигурациям переменных связей $\{b_{ij}\}$:

$$\mathcal{Z}_{\text{potts}} = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J_{ij}(\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1)} = \quad (2)$$

$$= \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{b_{ij}\}} \prod_{\langle ij \rangle} [(1 - p_{ij})\delta_{b_{ij},0} + p_{ij}\delta_{b_{ij},1}\delta_{s_i s_j}], \quad (3)$$

где $p_{ij} = 1 - \exp(-\beta J_{ij})$.

Каков физический смысл констант p ? Из стат. суммы (3) видно, что вес конфигураций, в которых есть связь между спинами с разным значением, равен нулю, а веса конфигураций, в которых связь b_{ij} между одинаковыми спинами соответственно присутствует и отсутствует, относятся как $p_{ij}/(1 - p_{ij})$. Таким образом, p_{ij} — вероятность существования связи между спинами с одинаковым значением.

В стат. сумме (3) переменные спинов и связей равноправны. Если просуммировать по конфигурациям связей $\{b_{ij}\}$, получится исходное выражение (2). Что получится, если просуммировать по конфигурациям спинов $\{\sigma_i\}$? Получившаяся модель называется моделью случайных кластеров Фортуина–Кастеляйна [4]. Стат. сумма этой модели:

$$\mathcal{Z}_{\text{FK}} = \sum_{\{b_{ij}\}} \prod_{b_{ij}=1} p_{ij} \prod_{b_{ij}=0} (1 - p_{ij}) q^{\#c}, \quad (4)$$

где через $\#c$ обозначено полное число кластеров в конфигурации (в смысле определения, данного выше). Заметим, что в этой модели параметр q может принимать не только целые, но и действительные значения. Можно показать, что фазовый переход второго рода происходит в этой модели при $q \in [0; 4]$.

1.2 Постановка задачи

В данной работе рассматривалась ферромагнитная модель Поттса с действительным (а не только целым) параметром $q \in [1; 4]$ и одинаковыми константами связи $J_{ij} \equiv J$ в точке фазового перехода второго рода. Ре-

палась задача нахождения методами численного эксперимента фрактальной размерности границ Фортуин–Кастеляйновских кластеров, их внешних периметров и границ спиновых кластеров (определения соответствующих объектов будут даны позднее, в разделе 4.2). Также было произведено сравнение значений, полученных для объектов, определённых на решётке, с теоретическими предсказаниями, полученными в непрерывном пределе.

2 Обзор теоретических работ

Многие точные результаты, касающиеся критического поведения модели Поттса были получены сначала методами кулоновского газа. Например, точное значение фрактальной размерности границ Фортуин–Кастеляйновских кластеров было вычислено в статье [5].

В следующем разделе мы рассмотрим соответствие между границей кластера и её *внешним периметром*, называемое дуальностью. В частности, дуальность проявляется в виде соотношения, связывающего две фрактальные размерности.

2.1 Дуальность Дюплантье

В статье [6] впервые была предложена дуальность между границей кластера и его внешним периметром, но только для случая перколяции по узлам. Позднее, эта дуальность была обобщена Дюплантье в работе [7] на критические интерфейсы кластеров в модели Поттса с произвольным q , а так же на петли в $O(N)$ модели.

Рассмотрим более подробно конструкцию Дюплантье. Пусть на комплексной плоскости задано множество C с границей ∂C . Если зафиксировать граничные условия для электростатического потенциала $H(z)$ так, что $H(\infty)=1$, а $H(\partial C) = 0$, то значение $H(w)$ даст вероятность того, что случайный броуновский блуждатель, стартовав из w , пересечёт окружность достаточно большого радиуса, проведённую вокруг C , прежде, чем коснётся C . Обозначим через $\partial C(r)$ множество точек, являющееся *внеш-*

ней границей объединения шаров радиуса r с центрами в ∂C . Другими словами, $\partial C(r)$ представляет собой границу ∂C , сдвинутую на r вовне.

При $r \rightarrow 0$ моменты потенциала, усреднённые по $\partial C(r)$, ведут себя, как

$$Z_n \equiv \left\langle \sum_{z \in \partial C(r)} H^n(z) \right\rangle \sim r^{\tau(n)}. \quad (5)$$

В статье [7] был найден полный спектр величин $\tau(n)$. В частности, при $n=0$, получаем размерность внешнего периметра $d_{EP} = -\tau(0)$. Таким образом, внешний периметр множества C определяется как граница области, из которой можно добраться до бесконечности, не коснувшись C , а его фрактальная размерность и размерность самой границы d_H связаны соотношением дуальности

$$(d_{EP} - 1)(d_H - 1) = 1/4. \quad (6)$$

Гипотеза о точных значениях фрактальных размерностей границ спиновых кластеров (то есть, кластеров, образованных узлами одного цвета) была высказана ещё в работе [8], и впоследствии получила поддержку в численном исследовании [29]. Согласно этой гипотезе, они также должны быть равны значениям, дуальным к фрактальным размерностям соответствующих ФК-кластеров в смысле формулы (6).

2.2 SLE

В этом разделе речь пойдёт о подходе к двумерным статистическим моделям, который отличается от привычного описания в терминах корреляционных функций. В этом подходе главным объектом рассмотрения становится какая-либо кривая, появляющаяся в конфигурациях модели, например, граница спинового кластера в модели Изинга.

Такое рассмотрение, с одной стороны, позволяет проще получить точные выражения для некоторых величин типа Left Passage Probability, с другой, даёт основу для строгих доказательств многих свойств.

Начнём с введения основных объектов: кривой интерфейса, уравне-

ния на её динамику и вероятностной меры на множестве кривых.

2.2.1 Эволюция Лёвнера и случайные кривые

Рассмотрим комплексную плоскость \mathbb{C} и односвязную область $\mathcal{D} \subset \mathbb{C}$. Мы будем описывать процесс роста непрерывной кривой γ_t , начинающийся в точке $a \in \partial\mathcal{D}$. Переменная $t \in [0, \infty]$ параметризует процесс: кривая увеличивается с ростом t . В конце процесса получается кривая γ_∞ , соединяющая точки a и $b \in \partial\mathcal{D}$.

Каким условиям должна удовлетворять кривая? Так как мы хотим, чтобы она представляла, например, интерфейс спинового кластера, естественно потребовать от кривой выполнения следующих свойств: она должна быть непрерывной, но дифференцируемость не требуется. Также, она не должна пересекать себя и границы области, но может иметь с ними общие точки. Заметим, что различить эти два события позволяет параметризация: мы требуем, чтобы кривая всегда локально была по одну сторону от выросшей ранее части.

Возможность таких «касаний» создаёт дополнительные сложности, так как в процессе роста кривая может отделять какие-то части области \mathcal{D} . Назовём дополнение до \mathcal{D} компоненты связности, границе которой принадлежит b , *оболочкой*, и обозначим K_t . Другими словами, оболочка — подмножество \mathcal{D} , до которого нельзя добраться без пересечения γ_t , выйдя из b . В простейшем случае, когда кривая является простой, $K_t \equiv \gamma_t$.

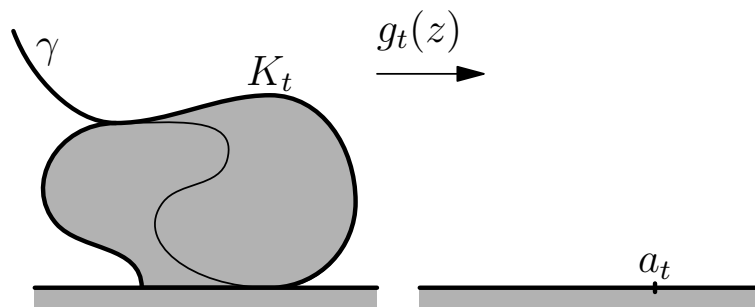


Рис. 1: К определению отображения $g_t(z)$

Обычный способ задания процесса роста кривой — через траекторию

точки её конца, обозначаемого, как и кривая, γ_t . Идея Лёвнера [9] состояла в том, чтобы описывать этот процесс по-другому — в терминах серии конформных отображений $g_t(z)$, переводящих область $\mathcal{D} \setminus \mathcal{K}_t$ обратно в исходную область \mathcal{D} (см. Рис. 1). Так как обе области односвязны, по теореме Римана такое преобразование всегда существует.

Как получить аналитическое выражение для уравнения, которому подчиняется эволюция $g_t(z)$? Для этого удобно перейти в некоторую стандартную область, например $\mathcal{D} = \mathbb{H}$ — верхняя полуплоскость комплексной плоскости, $a=0$, $b=\infty$. Для того, чтобы зафиксировать $g_t(z)$, введём требование, называемое иногда «гидродинамической нормировкой»: $g_t(z) \sim z + b(t)/z + o(1/z)$, $z \rightarrow \infty$. Коэффициент b увеличивается с ростом кривой. Поэтому, параметризацию t можно выбрать так, чтобы $b(t) = 2t$. Тогда уравнение на $g_t(z)$ выглядит так:

$$\frac{dg_t(z)}{dt} = \frac{2}{g_t(z) - a_t} \quad (7)$$

Здесь a_t — точка на действительной оси \mathbb{R} , в которую преобразование $g_t(z)$ переводит конец кривой γ_t .

Пусть теперь кривая случайна. Что это означает для решёточной модели? В этом случае количество различных конфигураций системы (а с ним и количество различных кривых), хоть и очень велико, но конечно. Каждая из конфигураций имеет свою вероятность, задаваемую распределением Гиббса. Поэтому, вероятность, с которой мы будем наблюдать в конфигурации одну из возможных кривых, есть просто сумма вероятностей конфигураций, в которых появляется такая кривая.

В непрерывном случае число конфигураций несчётно, поэтому задать вероятность существенно сложнее. Как это сделать, не прибегая к плохо определённой в общем случае понятию континуального предела известного дискретного распределения? Следует задать на множестве допустимых кривых вероятностную меру $P_{\mathcal{D},a,b}$. Как вводится этот объект, и как он соотносится с решёточными моделями, подробно описано в статье Шрамма [10].

2.2.2 Требуемые свойства меры

Предположим, что P удовлетворяет следующим свойствам:

- **марковость**

Пусть в некоторый момент t_0 конец кривой прошёл через точку $c \in \mathcal{D}$. Обозначим выросшую к этому моменту кривую через $\gamma_{[a,c]}$, а всю кривую от a до b через $\gamma_{[a,b]}$. Тогда вероятностная мера $P_{\mathcal{D},a,b}$, взятая при условии, что к t_0 выросла кривая $\gamma_{[a,c]}$, должна совпадать с мерой $P_{\mathcal{D} \setminus \gamma_{[a,c]},c,b}$, определённой уже на другой области и с другой начальной точкой:

$$P_{\mathcal{D},a,b}(\cdot | \gamma_{[a,c]}) = P_{\mathcal{D} \setminus \gamma_{[a,c]},c,b}(\cdot) \quad (8)$$

- **конформная инвариантность**

Пусть некоторое конформное преобразование плоскости $f(z)$ переводит область \mathcal{D} в область $\mathcal{D}' = f(\mathcal{D})$, а $f(a) = a'$ и $f(b) = b'$. Тогда индуцируемая этим отображением мера совпадает с мерой $P_{\mathcal{D}',a',b'}$. Более точно,

$$P_{\mathcal{D},a,b}(\gamma \subset U) = P_{\mathcal{D}',a',b'}(\gamma \subset f(U)) \quad (9)$$

Здесь U — некоторое подмножество области \mathcal{D} , через которое проходит кривая γ .

Заметим, что требование конформной инвариантности является содержательным только если мы каким-то образом можем независимо определить меру для другой области (скажем, определив её как непрерывный предел некоторой решёточной модели).

Ещё одно замечание состоит в том, что так определённая конформная инвариантность совпадает с конформной инвариантностью в смысле, обычно придаваемом этому понятию для двумерного броуновского движения.

Если наложить эти требования на стохастическую эволюцию Лёвнера, то, как доказывается в статье [10], процесс a_t очень легко описать:

$a_t = \sqrt{\kappa}B_t$, то есть броуновский процесс с коэффициентом диффузии κ .

Более подробное изложение этих результатов как с физической, так и с математической точки зрения можно найти в обзорах [11, 12, 13].

2.2.3 Фрактальная размерность и дуальность на языке SLE

Параметр κ определяет свойства следа процесса SLE_κ . В частности, его фрактальная (хаусдорфова) размерность равна $1+\kappa/8$, что было доказано Беффарой сначала для $\kappa=6$ в [14], а потом и в общем случае [15]. Более точно, с вероятностью единица размерность следа

$$d_f(\kappa) = \min(1 + \kappa/8, 2). \quad (10)$$

Можно доказать [16], что при $0 \leq \kappa \leq 4$ след почти наверняка является простой кривой, а при $4 < \kappa < 8$ «касается» сам себя.

Дуальность Дюплантье для следа SLE_κ можно нестрого сформулировать так: граница области, из которой можно уйти на бесконечность без пересечения следа SLE_κ , локально выглядит как $SLE_{16/\kappa}$. Строгую формулировку и доказательство можно найти в работах [17, 18].

2.2.4 Идентификация с решёточными моделями для конкретных κ

Считается, что непрерывные пределы многих решёточных моделей статистической физики должны соответствовать процессам SLE_κ в том смысле, что непрерывный предел меры некоторой кривой, определённой в дискретной модели (например, интерфейса кластера или следа блуждателя), совпадает с мерой для кривой SLE_κ .

К сожалению, построение непрерывного предела модели, определённой на решётке, и доказательство самого существования такого предела является сложной задачей, решённой только в некоторых случаях.

Случайное блуждание со стиранием петель (Loop Erased Random Walk) и путь, идущий по равномерно распределённым остовным деревьям (Uniform Spanning Trees) на квадратной решётке были рассмотрены

уже в [10]. Полное доказательство сходимости к SLE_2 было дано в [19]. Сходимость перколяции по узлам на треугольной решётке к SLE_6 была доказана в [20].

Также для модели Изинга была доказана сходимость границ Фортуйн–Кастеляйновских кластеров к $SLE_{16/3}$ и границ спиновых кластеров к SLE_3 . Изложение общего хода этого доказательства можно найти в [21]. Доказательство более общего результата, сходимости границ кластеров модели Поттса с произвольным числом цветов q к SLE_κ , где

$$\kappa = \frac{4}{1 - \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{\sqrt{q}}{2}\right)}, \quad (11)$$

пока не получено.

2.3 Проверившиеся аналитические значения

Выпишем здесь ещё раз для удобства те аналитические значения, с которыми сравнивались результаты, полученные в численном эксперименте. Так как значения, полученные различными теоретическими методами, совпадают, удобнее всего выписать их на языке SLE.

Модели Поттса с параметром q соответствует процесс SLE с параметром κ , задаваемым выражением (11). Это означает, что граница ФК–кластера соответствует кривой SLE_κ с фрактальной размерностью

$$d_{FK}^{(th)} = 1 + \kappa/8, \quad (12)$$

её внешний периметр и граница спинового кластера соответствуют дуальной кривой $SLE_{16/\kappa}$ с фрактальной размерностью

$$d_{EP}^{(th)} = d_{Spin}^{(th)} = 1 + 2/\kappa. \quad (13)$$

3 Обзор численных исследований

Приведём результаты нескольких численных работ, в которых исследовались кривые, сходящиеся к кривым SLE.

Уже в статьях [22, 23] было проведено Монте–Карло исследование границ кластеров, появляющихся в задаче перколяции по узлам на квадратной решётке в точке протекания. Была подсчитана фрактальная размерность границы и внешнего периметра (которые, напомним, должны сходиться к кривым SLE_6 и $SLE_{8/3}$ соответственно). Объект, который был взят в качестве внешнего периметра, определялся как граница множества узлов, до которых может добраться случайный блуждатель определённого размера, вышедший из достаточно далёкой точки, находящейся вне кластера. Уже в этой работе отмечается, что фрактальная размерность внешнего периметра оказалась не зависящей от размера блуждателя. Результаты таковы: размерность границы кластера $d_f = 1.76(2)$, размерность внешнего периметра $d_f^{EP} = 1.34(2)$.

В работе [24] исследовалась модель Поттса на треугольной и квадратной решётках для $q=2, 3$. Граничные условия первого типа выбирались так, чтобы значение спинов на части границы равно 1, на остальной границе — 2. В случае $q=2$ это не приводит к каким–то сложностям, однако при $q=3$ нарушается симметрия цветов спинов. Так как авторов интересовали в основном интерфейсы спиновых кластеров, это побудило их ввести два типа интерфейсов — интерфейс первого типа возникает между спинами первых двух цветов, начинается и заканчивается на границе решётки, иногда распадаясь на два интерфейса второго типа (между спинами цвета 3 и остальными). Граничные условия второго типа задавались так: на части границы спины принимают фиксированное значение 1, на остальной части флуктуируют.

Далее по интерфейсам измерялись их фрактальная размерность, вычислялись a_t — задающая функция SLE, а также вероятность того, что интерфейс пройдёт слева от заданной точки.

Вычисленное по фрактальной размерности $\kappa=2.976(20)$ находится в хорошем соответствии с теорией для модели Изинга (точное значе-

ние $\kappa=3$). Однако, для $q=3$ (точное значение $\kappa=10/3$) лишь полученное для граничных условий второго типа $\kappa=3.19(2)$ близко к теории, а для первых граничных условий вычисленное для интерфейса первого типа $\kappa=0.18(2)$ вообще ничему не соответствует, а $\kappa=4.78(6)$ для интерфейса второго типа близко к дуальному значению $\kappa'=4.8$.

Теоретическое значение вероятности прохода интерфейса слева от заданной точки даётся формулой Шрамма [25]. Результаты, полученные из сопоставления численных данных и формулы Шрамма для модели Изинга подтверждают теорию: $\kappa=3.02(2)$, а для $q=3$ существует расхождение: $\kappa=3.235(10)$.

К достоинствам статьи можно отнести большое количество исследованных величин, относящихся к интерфейсам, а к недостаткам — маленькую точность полученных значений, отсутствие какого-либо учёта поправок к скейлингу и сложности с определением границы спиновых кластеров в случае $q=3$.

В статье [26] проверялась дуальность фрактальных размерностей для границ ФК-кластеров и их внешних периметров. Моделирование проводилось на квадратной решётке одного размера: 4096×4096 , на которой весьма трудно получить равновесную конфигурацию, при этом учитывались только те кластеры, которые не касаются границы. Дополнительная трудность состояла в том, что для кластеров приходилось вычислять их характерный линейный размер. Авторы отмечают, что поправки к асимптотическому закону $L \sim R^{d_f}$ велики, и, чтобы получить правильные значения фрактальных размерностей, их необходимо как-то учитывать. Всё это привело к тому, что точность предъявленных результатов невелика. В статье также не приводится чёткого определения объекта, понимаемого под внешним периметром на решётке. Значения фрактальной размерности интерфейса ФК-кластера для $q \in \{1, 2, 3, 4\}$ соответственно $d_f=1.75(1), 1.66(1), 1.59(3), 1.50(1)$, фрактальной размерности внешнего периметра: $d_f^{EP}=1.33(5), 1.36(2), 1.40(3), 1.48(2)$.

В недавно вышедшей статье [27] похожие измерения проводились на треугольной решётке с периодическими граничными условиями. В отличие от [26], учитывались только те интерфейсы кластеров, которые

наматывались на тор решётки по одному направлению. Это даёт возможность дать однозначную оценку масштаба длины (а именно, длина стороны решётки). Авторы также отмечают, что на треугольной решётке проще дать однозначное определение внешнему периметру, чем на квадратной. Получены следующие результаты: фрактальная размерность интерфейса ФК-кластера для $q \in \{1, 2, 3, 4\}$ равна соответственно $d_f = 1.747, 1.663, 1.602, 1.510$, фрактальная размерность внешнего периметра: $d_f^{EP} = 1.330, 1.375, 1.412, 1.534$. К сожалению, отсутствие оценки ошибок этих результатов не даёт возможности судить о соответствии теоретическим предсказаниям.

Подсчёт распределения углов намотки (winding angle) и проверка соответствия предсказаниям SLE для границ ФК-кластеров и их внешних периметров были проведены в [28]. Моделирование проводилось на квадратной решётке с периодическими граничными условиями. Граница кластера определялась на медиальной решётке (то есть, решётке, узлы которой являются серединами рёбер исходной). Внешний периметр определялся как граница кластера, получавшегося из исходного после добавления незакрытых перемычек длины 1 (см. рис. 1 в оригинальной работе).

Дуальность фрактальных размерностей границ спиновых и ФК-кластеров проверялась в работе [29], но только для модели Поттса с $q=3$. Результаты находятся в отличном согласии с теорией: $\kappa=3.328(16)$ для границы спинового кластера (точное значение $\kappa=10/3$), а для границы ФК-кластера $\kappa=4.792(16)$ (точное значение $\kappa=4.8$). К сожалению, в работе не указано, как определялась граница спинового кластера, а так же как при измерении фрактальной размерности проводился учёт поправок к скейлингу, отсюда неясно, как оценивалась ошибка результатов.

4 Алгоритмы

4.1 Монте–Карло алгоритмы

Можно выделить два основных алгоритма моделирования модели Поттса с нецелым параметром q методом Монте–Карло: алгоритм, предложенный Свини в [30] и алгоритм, предложенный Чайесом и Махтой в [31].

В алгоритме Свини обновляются индивидуальные переменные связей в соответствии с вероятностями, даваемыми стат. суммой (4). Большой недостаток этого алгоритма в том, что для вычисления вероятности изменения переменной требуется знать, изменится ли общее число кластеров, если добавить/убрать рассматриваемую связь. Вследствие этого не удаётся достичь желаемой линейной по числу узлов асимптотической оценки быстродействия.

В оригинальной статье [30] описаны некоторые оптимизации, которые для двумерной решётки позволяют добиться асимптотики $O(N \log N)$, где N — число узлов. Для этого следует хранить границу кластера в специальной структуре данных. К сожалению, большое время работы не позволило использовать этот алгоритм в данной работе.

Алгоритм Чайеса и Махты применим только для количества цветов $q \in (1, 4)$ и работает за $O(N)$ времени. Один шаг алгоритма представлен на листинге 1.

Переменные σ_i представляют собой аналог значения спина в исходной модели (которые здесь уже не определены, так как q нецелое). Процедура `RNG()` выдаёт случайное действительное число в интервале $[0, 1)$.

Для поиска множества кластеров `Clusters` можно использовать несколько подходов, например, поиск в ширину, алгоритм Хошена–Копельмана. В данной работе использовался метод Ньюмана–Зиффа, также известный как лес непересекающихся множеств [32, 33], так как этот метод показал немного лучшее время работы.

Исследование критического замедления этих алгоритмов проводилось в работах [34, 35]. Ожидается, что в критической точке время спада корреляций $\tau \sim L^z$. Алгоритм Свини показывает немного меньшие

```

for all  $C \in \text{Clusters}$  do
  if  $\text{RNG}() < 1/q$  then
     $label \leftarrow 0$ 
  else
     $label \leftarrow 1$ 
  end if
  for all  $i \in C$  do
     $\sigma_i \leftarrow label$ 
  end for
end for
for all  $\langle i, j \rangle : \sigma_i = \sigma_j = 1$  do
  if  $\text{RNG}() < p$  then
     $b_{ij} \leftarrow 1$ 
  else
     $b_{ij} \leftarrow 0$ 
  end if
end for

```

Алгоритм 1: Один Монте–Карло шаг алгоритма Чайеса–Махты.

динамические экспоненты z , но какое–то критическое замедление всё–таки остаётся. В частности, для двумерной модели Изинга алгоритм Чайеса–Махты показывает $z = 0.25(1)$, а для алгоритма Свини не удаётся различить случаи ненулевого z и чисто логарифмического роста. Для двумерной модели Поттса с $q = 3$ алгоритмы Свини и Чайеса–Махты показывают соответственно $z = 0.48(1)$ и $z = 0.55(1)$.

4.2 Проблема определения границ кластеров

Здесь мы дадим определения всех интересующих нас объектов для квадратной (или любой планарной решётки). Главную роль в определениях границ и внешнего периметра играют *петли*, проходящие по медиальной решётке – решётке, рёбра которой соединяют середины соседних рёбер исходной решётки.

4.2.1 Петли на медиальной решётке

Конфигурация петель строится по конфигурации связей, определённых на исходной решётке. Покажем, как это происходит.

Главной составляющей является процедура $\text{NextLink}(e)$, которая сопоставляет ребру e медиальной решётки следующее ребро петли (см. Рис. 2). Тогда, последовательно применяя NextLink , можно, имея одно звено петли, последовательно перечислить все звенья. Легко доказать, что для любой конфигурации связей на исходной решётке с периодическими граничными условиями получаются именно петли (то есть, замкнутые цепочки звеньев).

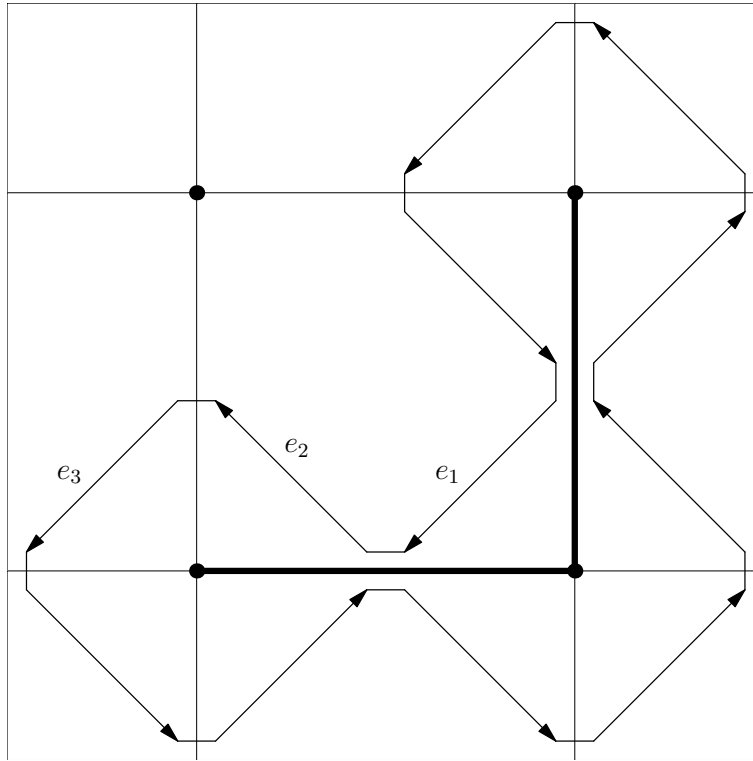


Рис. 2: Типичная петля вокруг кластера из трёх вершин. $e_2 = \text{NextLink}(e_1)$, $e_3 = \text{NextLink}(e_2)$ и так далее.

При периодических граничных условиях нас будут интересовать *топологически нетривиальные* петли (то есть такие, которые нельзя стя-

нуть в точку непрерывным преобразованием). Как понять, что данная петля топологически нетривиальна?

Определим процедуру $\text{Winding}(e)$, для каждого звена e возвращающую пару (wx, wy) , причём числа $wx, wy \in \{0, 1, -1\}$ означают, происходит ли переходе по этому звену переход через границу решётки, и если да, то в какую сторону.

Алгоритм 2 для звена e определяет длину и числа намотки петли, которой принадлежит данное звено. Числа намотки (winding numbers) имеют смысл при периодических граничных условиях и, в интуитивных терминах, представляют собой количество раз, с которым петля наматывается на тор решётки по каждому из направлений. Можно показать, что петля топологически нетривиальна тогда и только тогда, когда числа намотки не равны нулю.

```

l ← 0, wx ← 0, wy ← 0
e' ← e
do
  l ← l + 1
  (wx, wy) ← (wx, wy) + Windings(e)
  e' ← NextLink(e')
while e' ≠ e
return (l, wx, wy)

```

Алгоритм 2: $\text{TraceLoop}(e)$

4.2.2 Топологически нетривиальные границы

Пусть задана решётка с периодическими граничными условиями, а на ней некоторая конфигурация связей. Напомним, что *кластером* мы называем множество вершин, такое что между любыми двумя вершинами этого множества можно пройти по присутствующим в конфигурации связям.

Назовём *границей кластера* любую примыкающую к нему петлю. Таких петель может быть несколько. Нас будут интересовать топологически нетривиальные границы, так как они являются некоторым аналогом

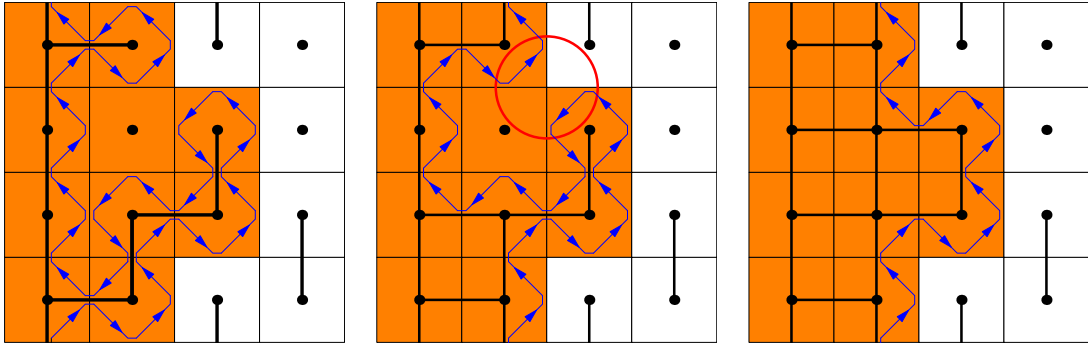


Рис. 3: Граница ФК–кластера, её внешний периметр и граница спинового кластера.

границ бесконечной длины¹, которые возможны только на бесконечной решётке. В частности, можно надеяться, что такие границы выживают в непрерывном пределе.

Теперь интересующие нас объекты можно определить как топологически нетривиальные границы кластеров, возникающих в некоторой конфигурации связей (см. Рис. 3):

- Пусть конфигурация связей на решётке подчиняется распределению, задаваемому стат. суммой (4). Кластеры, возникающие при этом, назовём *Фортуин–Кастеляйновскими* или *ФК–кластерами*.
- Возьмём ФК–кластер с топологически нетривиальными границами. Добавим все недостающие связи между узлами кластера. У получившегося кластера также будут нетривиальные границы, которые мы назовём *внешним периметром* (External Perimeter) кластера.

Такое определение закрывает только самые узкие перемычки в границе кластера. Можно построить последовательность всё более и более сглаженных внешних периметров в духе [23]. Для этого, например, нужно закрыть проходы не только шириной в одну связь, но и такие, как отмеченный на Рис. 3 окружностью.

¹Заметим, что у кластера с бесконечным числом вершин не обязательно существует граница бесконечной длины.

- Возьмём конфигурацию переменных узлов $\{\sigma_i\}$, возникающую в алгоритме Чайеса–Махты. Добавим все связи между узлами с $\sigma_i=1$ (фактически, выполним шаг алгоритма по добавлению связей при нулевой температуре). Получившиеся кластеры назовём *спиновыми*.

Заметим, что такое определение естественным образом обобщает определение спинового кластера как множества соседних вершин с одинаковым цветом. Ещё одно замечание состоит в том, что, согласно вышеприведённым определениям, внешний периметр спинового кластера совпадает с его границей.

Не в каждой конфигурации находится кластер с нетривиальной границей. Доля таких конфигураций зависит от числа цветов q и слабо зависит от линейного размера решётки L .

4.2.3 Алгоритм поиска границ

Алгоритм 3 возвращает множество всех топологически нетривиальных петель в данной конфигурации.

Множество `Exits` представляет собой множество всех звеньев, находящихся на верхней и левой границах решётки. Очевидно, что если петля топологически нетривиальна, то одно из её звеньев будет принадлежать этому множеству.

Простая, но очень важная оптимизация состоит в том, что уже пройденные петли помечаются с помощью процедуры `LabelLoop($e, label$)` так, что если мы уже прошли по петле l , и $e \in l$, то `Label(e)` $\neq 0$. Это позволяет не проходить по одной и той же петле несколько раз и добиться времени работы в наихудшем случае $O(L^2)$. Процедура `ClearLabels()` очищает все метки.

Побочным эффектом от выполнения алгоритма 3 является то, что все топологически нетривиальные петли имеют свою метку, отличающуюся от меток других петель. Это оказывается полезным при построении внешних периметров.

```

ClearLabels()
loops ← ∅
label ← 1
for e ∈ Exits do
  if Label(e) = 0 then
    (l, wx, wy) ← TraceLoop(e)
    LabelLoop(e, label)
    label ← label + 1
    if wx ≠ 0 or wy ≠ 0 then
      loops ← loops ∪ e
    end if
  end if
end for
return loops

```

Алгоритм 3: FindNontrivialLoops()

5 Моделирование и результаты

Компьютерное моделирование проводилось на кластере Wall с использованием генератора случайных чисел Mersenne Twister (MT19937) с периодом $2^{19937}-1$ [36]. Для каждого $q \in \{1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4\}$ измерения проводились на квадратных решётках с периодическими граничными условиями. Набор размеров решёток L и количество независимых запусков для каждого размера указаны в Табл. 1.

L	32	64	96	125	162	211	274	356	463	602	783	1024	1323
Runs	1000	1000	1000	1000	1000	1000	500	500	500	500	150	150	150

Таблица 1: Количество независимых запусков для различных размеров решётки.

Каждый независимый запуск состоял из $2 \cdot 10^4$ шагов Монте–Карло (MCS) термализации, во время которой никакие измерения не велись, и 10^5 MCS для сбора статистики. После каждого из таких шагов производился поиск топологически нетривиальных интерфейсов всех трёх типов. В i -м запуске находилось среднее значение l_i . Для того, чтобы найти по k запускам окончательную среднюю длину и её ошибку для конкретных q и размера решётки, вычислялось среднее значение и стан-

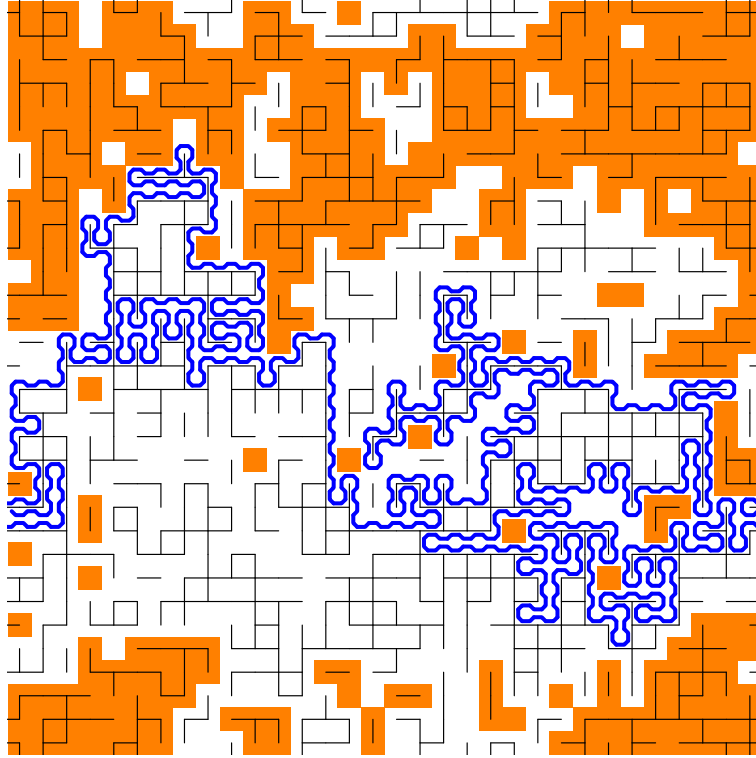


Рис. 4: Пример конфигурации, $q=2$, $L=32$. Значения спинов показаны разными цветами, отмечен топологически нетривиальный интерфейс.

дартное отклонение:

$$l = \frac{1}{k} \sum_{i < k} l_i; \quad \Delta l = \frac{1}{\sqrt{k}} \sqrt{\frac{1}{k-1} \sum_{i < k} (l_i - l)^2}. \quad (14)$$

5.1 Анализ численных данных

Для каждого значения q и типа интерфейса фрактальная размерность вычислялась с помощью метода наименьших квадратов. Мы ожидаем, что в скейлинговом пределе $l \sim L^{d_f}$, где d_f — фрактальная размерность соответствующего интерфейса, а l — его средняя длина для данного размера решётки.

Однако, даже на рассматриваемых размерах решётки поправки к скейлингу могут быть весьма сильны. При этом, можно ожидать как

аналитических (с целыми степенями L), так и неаналитических поправок, и сказать заранее, какая из них окажется наиболее заметной, очень сложно.

Для метода наименьших квадратов мы использовали следующие зависимости:

$$f_1(L) = AL^{d_f}(1 + b/L), \quad (15)$$

$$f_2(L) = AL^{d_f}(1 + b/L^c). \quad (16)$$

Зависимость (15) отвечает главной аналитической поправке, а для зависимости (16) степень поправки c может принимать любые значения. В некоторых случаях поправки на малых значениях L так и не удаётся учесть, и точки до некоторого значения L_{min} приходится отбрасывать. Как оценить, насколько хорошо данная зависимость приближает экспериментальные данные? Мы использовали для этого критерий χ^2 , который говорит, что если ошибки в экспериментальных данных подчиняются нормальному распределению, то величина χ^2 , делённая на число степеней свободы², должна быть близка к единице.

Далее следует подробное описание того, как были получены фрактальные размерности для каждого значения q .

5.1.1 Перколяция: $q = 1$

Для интерфейса ФК-кластера (Hull) начиная с $L = 64$ никакие поправки не видны. Хороший χ^2 даёт уже зависимость $f(L) = AL^{d_f}$.

Для внешнего периметра интерфейса ФК-кластера (EP) чётко видна целочисленная поправка. Если последовательно убирать начальные точки при приближении зависимостью (16), значение d_f стабилизируется при $L_{min} = 125$.

Результаты представлены в Табл. 2.

²Напомним, что числом степеней свободы (ndf) называется количество измерений минус количество параметров в зависимости

Тип интерфейса	L_{min}	зависимость	χ^2	d_f	d_f согласно теории
Hull	64	AL^{d_f}	1.1	1.75002(2)	1.75
EP	125	$AL^{d_f}(1 + b/L)$	1.3	1.33331(9)	4/3

Таблица 2: Результаты для $q=1$.

5.1.2 $q = 1.5$

По-видимому, для всех типов интерфейсов главными являются целочисленные поправки. Для интерфейса ФК-кластера значение d_f стабилизируется уже к $L_{min}=64$, для внешнего периметра и интерфейса спинового кластера (тип интерфейса Spin) начиная с $L_{min}=125$.

Тип интерфейса	L_{min}	зависимость	χ^2	d_f	d_f согласно теории
Hull	64	$AL^{d_f}(1 + b/L)$	0.92	1.70449(7)	1.704439
EP	125	$AL^{d_f}(1 + b/L)$	2.1	1.35460(17)	1.354892
Spin	125	$AL^{d_f}(1 + b/L)$	0.43	1.35487(18)	1.354892

Таблица 3: Результаты для $q=1.5$.

5.1.3 Модель Изинга: $q = 2$

Для интерфейса ФК-кластера начиная с $L_{min} = 96$ поправка очень слаба и практически теряется на фоне ошибки. Тем не менее, если допустить существование небольшой целочисленной поправки, результат при дальнейшей отбрасывании точек стабилен в пределах ошибки.

Для внешнего периметра поправка весьма сильна и хорошо приближается простой аналитической функцией только начиная с $L=356$. если отбросить все точки с меньшим L , зависимость типа (16) даёт хороший результат.

Для интерфейса спинового кластера поправка неразличима на фоне ошибки. При приближении зависимостью $f(L)=AL^{d_f}$ значение d_f стабилизируется после $L_{min}=96$.

Тип интерфейса	L_{min}	зависимость	χ^2	d_f	d_f согласно теории
Hull	96	$AL^{d_f}(1+b/L)$	1.1	1.66673(13)	5/3
EP	356	$AL^{d_f}(1+b/L)$	0.52	1.37479(52)	1.375
Spin	96	AL^{d_f}	1.0	1.37514(8)	1.375

Таблица 4: Результаты для $q=2$.

5.1.4 $q = 2.5$

Для интерфейса ФК-кластера аналитическая поправка даёт неплохой результат, и начиная с $L_{min}=64$ значение d_f стабилизируется. Для внешнего периметра аналитические поправки не дают удовлетворительного результата даже если оставить только точки с самыми большими L . Приближение зависимостью (16) даёт стабильный результат, при этом степень поправки $c=0.49(2)$.

Для интерфейса спинового кластера сравнительно большие ошибки не позволяют надёжно установить вид поправки, поэтому использовалась зависимость (15), так как она более устойчива.

Тип интерфейса	L_{min}	зависимость	χ^2	d_f	d_f согласно теории
Hull	64	$AL^{d_f}(1+b/L)$	0.37	1.63275(8)	1.632739
EP	32	$AL^{d_f}(1+b/L^c)$	1.2	1.39529(94)	1.395108
Spin	96	$AL^{d_f}(1+b/L)$	0.6	1.39458(25)	1.395108

Таблица 5: Результаты для $q=2.5$.

5.1.5 $q = 3$

Для интерфейса ФК-кластера аналитическая поправка хорошо согласуется с данными. Начиная с $L_{min} = 125$ значение d_f стабилизируется. Для внешнего периметра, так же как и для $q = 2.5$, только аналитическая поправка не даёт удовлетворительного результата. Приближение зависимостью (16) даёт стабильный результат со степенью поправки $c=0.39(1)$. То же для интерфейса спинового кластера, с $c\sim 0.3$, при этом процедура МНК вычислительно весьма неустойчива.

Тип интерфейса	L_{min}	зависимость	χ^2	d_f	d_f согласно теории
Hull	125	$AL^{d_f}(1 + b/L)$	0.23	1.60024(11)	1.6
EP	32	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	0.39	1.41752(97)	17/12
Spin	64	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	1.16	1.4177(97)	17/12

Таблица 6: Результаты для $q=3$.

5.1.6 $q = 3.5$

Для всех типов интерфейсов наилучший результат даёт поправка с произвольной степенью. Степень $c=0.6(1), 0.35(2), 0.16(4)$ для интерфейса ФК-кластера, внешнего периметра и интерфейса спинового кластера соответственно. Заметим, что точность результатов по сравнению с другими q невысока.

Тип интерфейса	L_{min}	зависимость	χ^2	d_f	d_f согласно теории
Hull	32	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	1.3	1.5651(15)	1.564989
EP	32	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	0.95	1.4377(35)	1.442487
Spin	32	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	0.49	1.455(20)	1.442487

Таблица 7: Результаты для $q=3.5$.

5.1.7 Логарифмические поправки: $q = 4$

Для этого значения q , как выяснено в статье [37], поправки носят логарифмический характер. По виду поправки, изображённого на Рис. 5, видно, что это подтверждается данными. Учесть логарифмические поправки при обработке численных данных очень сложно, и результаты получаются ненадёжные. Можно получить лучшие результаты, если использовать явный предсказываемый вид поправки, однако, такой способ не является прямой проверкой теории.

Тип интерфейса	L_{min}	зависимость	χ^2	d_f	d_f согласно теории
Hull	32	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	0.6	1.5174(54)	1.5
EP	32	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	0.9	1.4375(49)	1.5
Spin	32	$AL^{d_f}(1 + b/L^c)$	1.5	1.445(17)	1.5

Таблица 8: Результаты для $q=4$.

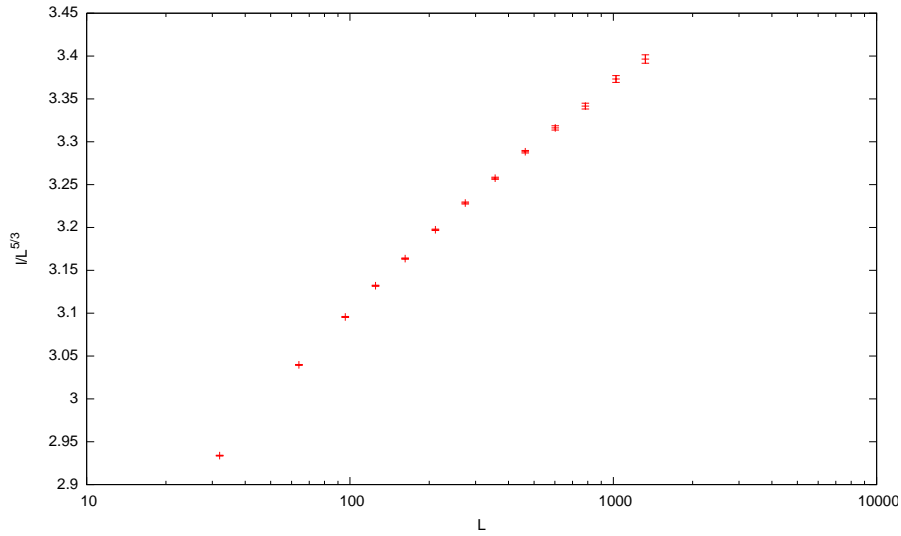


Рис. 5: Вид поправки для $q=4$.

5.2 Обсуждение результатов

Для удобства, все результаты, а также результаты других численных исследований собраны в Табл. 9. В целом, совпадение с теоретическими предсказаниями хорошее, но при приближении к $q=4$, точность численных результатов падает. Можно предположить, что при увеличении q неаналитические поправки выходят из тени аналитической, становясь всё менее irrelevantными, а при $q=4$ становятся маргинальными.

Отметим, что уже внешний периметр, получаемый закрытием «горлышек» шириной в одну связь, даёт правильное значение фрактальной размерности. В конструкции Дюплантье (раздел 2.1) такое определение соответствует $r \sim a/2$, где a — постоянная решётки.

Гипотеза дуальности значений фрактальных размерностей границ Фортуин–Кастеляйновского и спинового кластера также с хорошей точностью подтверждается для $1 < q < 4$.

q	источник	d_{FK}	d_{EP}	d_{spin}
$q = 1$	теория	1.75	4/3	–
	эта работа	1.75002(2)	1.33331(9)	–
	работа [27]	1.747	1.330	–
$q = 1.5$	теория	1.70444	1.35489	1.35489
	эта работа	1.70449(7)	1.3546(2)	1.3549(2)
$q = 2.0$	теория	5/3	1.375	1.375
	эта работа	1.6667(1)	1.3747(5)	1.37514(8)
	работа [24]	–	–	1.372(2)
	работа [27]	1.663	1.375	–
$q = 2.5$	теория	1.63274	1.39511	1.39511
	эта работа	1.63275(8)	1.3953(9)	1.3946(3)
$q = 3.0$	теория	1.6	1.41667	1.41667
	эта работа	1.6002(1)	1.418(1)	1.418(1)
	работа [24]	–	–	1.399(2)
	работа [29]	1.599(2)	–	1.416(2)
	работа [27]	1.602	1.412	–
$q = 3.5$	теория	1.56498	1.44248	1.44248
	эта работа	1.565(2)	1.438(4)	1.46(2)
$q = 4$	теория	1.5	1.5	1.5
	эта работа	1.565(2)	1.438(5)	1.45(2)
	работа [27]	1.510	1.534	–

Таблица 9: Сводная таблица результатов

6 Заключение

В работе проведено численное исследование фрактальных свойств интерфейсов Фортуин–Кастеляйновских кластеров, их внешних периметров и интерфейсов спиновых кластеров в модели Поттса. При этом, мы не ограничились целыми значениями параметра q . Проведено сравнение полученных значений фрактальных размерностей с теоретическими предсказаниями.

В заключение я хотел бы выразить благодарность Щуру Льву Николаевичу за постановку задачи, Меньшутину Антону за помощь с вычислительным кластером, Барашу Льву за помощь с генераторами случайных чисел, а также всем им за плодотворные дискуссии.

Список литературы

- [1] R. B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952).
- [2] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [3] R. G. Edwards and A. D. Sokal, Phys. Rev. D **38**, 2009 (1988).
- [4] C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, Physica (Amsterdam) **57**, 536 (1972).
- [5] H. Saleur and B. Duplantier, Phys. Rev. Lett. **58**, 2325 (1987).
- [6] M. Aizenman, B. Duplantier, and A. Aharony, Phys. Rev. Lett. **83**, 1359 (1999).
- [7] B. Duplantier, Phys. Rev. Lett. **84**, 1363 (2000).
- [8] C. Vanderzande, J. Phys. A **25**, L75 (1992).
- [9] K. Löwner, Math. Ann. **89**, 103 (1923).
- [10] O. Schramm, Isr. J. Math. **118**, 221 (2000).
- [11] W. Werner, arXiv:math/0511268v1(2005).
- [12] M. Bauer and D. Bernard, Phys. Rep. **432**, 115 (2006).
- [13] J. Cardy, Ann. Phys. **318**, 81 (2005).
- [14] V. Beffara, Ann. Prob. **32(3)**, 1421 (2004).
- [15] V. Beffara, Ann. Prob. **36(4)**, 1421 (2008).
- [16] S. Rohde and O. Schramm, Ann. Math. **161**, 879 (2005).
- [17] D. Zhan, arXiv:0712.0332(2007).
- [18] D. Zhan, arXiv:0803.2223(2008).
- [19] G. F. Lawler, O. Schramm, and W. Werner, Ann. Prob. **32**, 939 (2004).

- [20] S. Smirnov, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math. **333(3)**, 239 (2001).
- [21] S. Smirnov, Proceedings of the International Congress of Mathematicians (ICM), Madrid, Spain, August 22-30, 2006 **Vol. II**, 1421 (2006).
- [22] T. Grossman and A. Aharony, J. Phys. A **16**, L745 (1986).
- [23] T. Grossman and A. Aharony, J. Phys. A **20**, L1193 (1987).
- [24] A. Gamsa and J. Cardy, J. Stat. Mech. **8**, 20 (2007).
- [25] O. Schramm, Electron. Comm. Probab. **6**, 115 (2001).
- [26] J. Asikainen, A. Aharony, B. B. Mandelbrot, E. Rausch, and J. Hovi, Eur. Phys. J. B **34**, 479 (2003).
- [27] D. A. Adams, L. M. Sander, and R. M. Ziff, J. Stat. Mech. **3**, 4 (2010).
- [28] B. Wieland and D. B. Wilson, Phys. Rev. E **68**, 056101 (2003).
- [29] J. L. Jacobsen, P. Le Doussal, M. Picco, R. Santachiara, and K. J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **102**, 070601 (2009).
- [30] M. Sweeny, Phys. Rev. B **27**, 4445 (1983).
- [31] L. Chayes and J. Machta, Physica A **254**, 477 (1998).
- [32] M. E. J. Newman and R. M. Ziff, Phys. Rev. E **64**, 016706 (2001).
- [33] T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest, and C. Stein, *Introduction to algorithms* (Mit Press, 2002).
- [34] J.-S. Wang, O. Kozan, and R. H. Swendsen, Phys. Rev. E **66**, 057101 (2002).
- [35] X. Qian, Y. Deng, and H. W. J. Blöte, Phys. Rev. E **71**, 016709 (2005).
- [36] M. Matsumoto and T. Nishimura, ACM Trans. Model. Comput. Simul. **8**, 3 (1998).
- [37] M. Nauenberg and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).