ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ

УДК 519.2

А.Н. Бондаренко, А.Ю. Гунькин

КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ НА САМОПОДОБНЫХ РЕШЁТКАХ[1]

Рассмотрены методы комбинаторного вычисления высокотемпературного разложения для самоподобных решёток в модели Изинга. Актуальность темы связана с методами неразрушающего контроля усталости металлов.

Ключевые слова: *самоподобные решётки, высокотемпературное разложение, метод Фабио.*

Не так давно перед учеными встала задача разработки методов неразрушающего контроля усталости металлов. Выяснилось, что система трещин в металле может успешно моделироваться самоподобными решётками [1]. На таких решётках может быть построена модель Изинга, которая позволяет смоделировать интересующие нас свойства ферромагнетиков, кроме того, позволяет вычислить температуру, называемую температурой Кюри, при нагревании до которой происходит фазовый переход и потеря веществом способности к спонтанному намагничиванию. Исходя из значения температуры для рассматриваемого металла, можно сделать вывод о его усталости.

Обзор «The American Physical Society» позволил найти две статьи [5, 7], в которых было описано как применить метод высокотемпературного разложения магнитной восприимчивости к конкретному ковру Серпинского бесконечного порядка ветвления. За основу для написания программы была взята статья D.A. Fabio «High-temperature series expansion for Ising-like systems on fractals» [7], используя идеи которой были созданы конкретные алгоритмы для решения задачи.

Невозможность применения формул, предложенных в статье [7], сделала необходимым корректировку данных формул и разработку новых, которые приведены в тексте этой статьи.

1. Модель Изинга

В качестве энергии состояния или конфигурации σ двумерной модели Изинга назовём функционал

$$E(\sigma) = -J\sum_{(x,y)}\sigma_x\sigma_y - H\sum_x \sigma_x. \qquad (1)$$

В первом слагаемом суммирование ведётся по всем парам соседних узлов (x, y), во втором – по всем узлам решётки x. При этом J, H – некоторые параметры.

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 11-01-00105 а) и Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 14 «Обратные задачи и их приложения: теория, алгоритмы, программы».

Если J и H в выражении (1) положительны, то модель Изинга описывает идеализированную физическую систему – двумерный ферромагнетик. Решётка модели соответствует кристаллической решётке магнетика, спины изображают магнитные моменты атомов кристалла. Параметрам J и H можно придать физический смысл: H – это напряженность внешнего магнитного поля, перпендикулярного плоскости решётки, а J характеризует взаимодействие магнитных моментов. В основном состоянии все спины направлены в одну сторону, что приводит к возникновению ненулевого магнитного момента всего кристалла.

Рассмотрим случай $J > 0$. Величина

$$Z_N = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{\sigma} \exp\left(K \sum_{(x,y)} \sigma_x \sigma_y + h \sum_{x} \sigma_x \right), \tag{2}$$

где $K = J/T$, $h = H/T$, T – абсолютная температура, называется статистической суммой или статсуммой. Суммирование ведётся по всем возможным состояниям системы.

Точно были решены лишь одномерная модель Изинга с учётом влияния внешнего магнитного поля [2] и двумерная модель Изинга вне присутствия внешнего магнитного поля [3]. Также было доказано [4], что для модели, выполненной на самоподобной решётке, можно построить точное решение, если эта решётка имеет конечный порядок ветвления, то есть распадается на две части путём совершения конечного числа разрезов по рёбрам. В этом случае фазового перехода не будет, так как ферромагнитные свойства не проявляются и, как следствие, критическая температура – нулевая. Соответственно ни трехмерная модель Изинга, ни модель на самоподобной решётке бесконечного порядка ветвления решена не была.

Попытка построить приближенное решение для самоподобной решётки, оперируя непосредственно со статистической суммой и используя разложения, полученные в решении двумерной модели, не удалась из-за низкой точности результатов. Отсюда был сделан вывод, что исследовать надо не саму статсумму, а некую производную от неё функцию.

Наиболее точным для любых видов самоподобных решёток является метод высокотемпературного разложения. Данный метод позволяет непосредственно получить частичную сумму ряда, в которую разлагается магнитная восприимчивость χ ферромагнетика.

2. Высокотемпературное разложение для магнитной восприимчивости

Известно, что магнитная восприимчивость задаётся следующим выражением:

$$\frac{\chi}{kT} = \frac{\partial^2}{\partial H^2}\left(\frac{\ln(Z_N)}{N} \right), \tag{3}$$

где

$$Z_N(\nu, \tau) = (\operatorname{ch} \beta J)^{2N} (\operatorname{ch} \beta H)^N \sum_{\{\sigma\}} \prod_{<ij>} (1 + \nu \sigma_i \sigma_j) \prod_{k} (1 + \tau \sigma_k) . \tag{4}$$

Здесь $\nu = \operatorname{th}(\beta J)$, $\tau = \operatorname{th}(\beta H)$, $\beta = \dfrac{1}{kT}$.

Переходя к термодинамическому пределу и используя разложение в ряд Тейлора при $\tau = 0$, получаем

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(\nu, \tau) = \ln Z(\nu) + \frac{1}{2}\tau^2 \chi(\nu) + \dots , \tag{5}$$

где $\chi(\nu)$ – магнитная восприимчивость при нулевом внешнем магнитном поле.

Используя тот же способ выделения путей на решётке, что и ранее, и учитывая тот факт, что

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \sigma = 0 , \quad \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma^2 = 2 , \tag{6}$$

получаем

$$\chi(\nu) = 1 + \sum_{r\geq 1} d_r \nu^r , \tag{7}$$

где

$$d_r = \sum_{g\in G_r} 2\Gamma(g) W_r(g) . \tag{8}$$

Здесь G_r – множество незамкнутых графов длины r, $W_r(g)$ – вес графа или количество его не совмещаемых наложением симметрий, $\Gamma(g)$ – количество вложений графа в бесконечную самоподобную решётку, приходящихся на один узел.

3. Метод Фабио

Рассмотрим ковёр Серпинского, характеризуемый параметрами b и m. Самоподобная решётка на l-м шаге формируется посредством $b^2 - m$ воспроизведений фрактала на предыдущем шаге $l-1$ с исключением m квадратов в середине.

Число вложений $G(l)$ конкретного графа в решётке на шаге l даётся выражением

$$G(l) = (b^2 - m) G(l-1) + H(l-1) , \tag{9}$$

где

$$H(l-1) = H_1(l-1) + H_2(l-1) . \tag{10}$$

Здесь $H_1(l-1)$ и $H_2(l-1)$ представляют собой число вложений графа, которые пересекают одно и более чем одно перекрытие между воспроизведёнными на l-м шаге итерациями фрактала шага $(l-1)$.

Теперь, для этого конкретного графа, рассмотрим минимальный шаг l_0, на котором решётка его вмещает, и далее выполним следующие пункты:

- Вычислим общее количество возможных вложений графа на шаге l_0. Это будет $G(l_0)$.

- Рассмотрим два соседних воспроизведения шага l_0 и посчитаем общее количество вложений, которые пересекают границу между ними. Это даст нам $H_1(l_0)$.

- Рассмотрим три или четыре соседних воспроизведения фрактального шага l_0 и такие вложения графа, которые пересекают между ними две или более границы. Если говорить более точно, с учётом того, что граф может располагаться на самой границе, существуют такие конкретные вложения графа, которые используют три или четыре соседних блока и не могут использовать меньшее их количество. Таким образом мы получим $H_2(l_0)$.

Несложно видеть, что

$$H_1(l-1) = bH_1(l-2) + (b-1)C_1; \tag{11}$$

$$H_2(l-1) = H_2(l_0) = C_2, \tag{12}$$

где C_1 и C_2 зависят только от вложения графа на шаге l_0 и геометрических свойств генератора фрактала. C_1 представляет собой те вложения графа, которые используют на l_0+1 шаге ровно два блока, построенных на шаге l_0 и вылезающих за внешнюю граница фрактала шага l_0+1.

Проведя итерацию формулы (11) и используя (9), получаем

$$H(l-1) = D_1 b^{l-1} + D_2, \tag{13}$$

где

$$D_1 = \frac{H_1(l_0) + C_1}{b^{l_0}}, \; D_2 = H_2(l_0) - C_1. \tag{14}$$

И, наконец, используя (9) и (13) можно получить конкретное выражение для $G(l)$ в виде

$$G(l) = A(b^2 - m)^l + Bb^l + C, \tag{15}$$

где A, B, C есть функции от $[C_1, H_1(l_0), H_2(l_0), G(l_0)]$;

$$A = \frac{1}{(b^2-m)^{l_0}}\left[G(l_0) + \frac{D_1 b^{l_0}}{b^2-b-m} + \frac{D_2}{b^2-m-1}\right]. \tag{16}$$

Оказывается, что формула (15) верна и для числа узлов $N(l)$, то есть

$$N(l) = A'(b^2-m)^l + B'b^l + C'; \tag{17}$$

$$A' = \frac{N(1)}{(b^2-m)} - \frac{L_v(1)b}{(b^2-m)(b^2-m-b)} + \frac{N_v(1) - L_v(1)}{(b^2-m)(b^2-m-1)}; \tag{18}$$

$$B' = \frac{L_v(1)}{(b^2-m-b)}; \tag{19}$$

$$C' = \frac{L_v(1) - N_v(1)}{(b^2-m-1)}, \tag{20}$$

где $N(1)$ – число всех узлов шаблона, $N_v(1)$ – число внутренних узлов шаблона, $L_v(1)$ – число внутренних связей. Отсюда, распределение конкретного графа на бесконечной фрактальной решётке задается через

$$g = \lim_{l\to\infty} \frac{G(l)}{N(l)} = \frac{A}{A'}. \tag{21}$$

Из формулы (21) можно точно получить коэффициенты в магнитной восприимчивости при степени соответствующего порядка путём рассмотрения вкладов всех графов.

Метод, предложенный в работе Фабио, можно протестировать с помощью численного моделирования. Для этого рассмотрим конкретный пример решётки и для неё вычислим критический параметр $\nu_c = \operatorname{th}\left(\frac{J}{kT_c}\right)$, где T_c – критическая температура.

Для ковра Серпинского, с $b=3, m=1$, было проведено компьютерное моделирование для вычисления высокотемпературного разложения магнитной восприимчивости вплоть до девятого коэффициента. Полученные значения d_n согласуются со значениями, полученными в работе [5]. Однако значения критического параметра ν_c отличаются от представленных в работе [7]. Это различие может быть обусловлено наличием графов специфического типа, для которых требуется уточнение формул (9) – (12), предложенных в работе Фабио.

Рассмотрим сначала граф, который представляет собой участок прямой. Тогда в формуле (9) он будет посчитан дважды каждый раз, когда вложение будет оказываться на границе между соседними блоками-итерациями. Таких границ на каждом шаге будет $[b(b-1)-(m+1)m]$, а на самой границе граф может быть размещен $b^{l-1}+1-size$, где $size$ – его длина. Отсюда поправка для (9) выглядит следующим образом:

$$G(l) = (b^2-m)G(l-1) + H(l-1) - [b(b-1)-(m+1)m]\times[b^{l-1}+1-size]. \qquad (22)$$

Обозначим

$$D = [b(b-1)-(m+1)m]\times[b^{l-1}+1-size]. \qquad (23)$$

Далее, если рассматривать вложения графа, которые дают вклад в $H_1(l) = H(l)$, то те из них, которые попадут на границу, также будут посчитаны дважды. Для каждого пересечения раздела между соседними итерациями таких вложений будет $(size-1)$.

$$H(l-1) = bH(l-2) - \operatorname{sign} H(l_0)\times(b-1)\times(b(b-1)-m(m+1))\times(size-1). \qquad (24)$$

Аналогично, как и раньше, из (24) получаем

$$H(l-1) = D_1 b^{l-1} + D_2, \qquad (25)$$

где

$$D_1 = \frac{H_1(l_0)-\hat{A}}{b^{l_0}}, \qquad (26)$$

$$D_2 = \hat{A} = \operatorname{sign} H(l_0)\times(b(b-1)-m(m+1))\times(size-1). \qquad (27)$$

Отсюда

$$G(l) = b^2 G(l-1) + D_1 b^{l-1} + E, \qquad (28)$$

где $E = \hat{A} - D = D_2 - D$.

Теперь, сделав итерацию для (28), получаем

$$G(l) = A(b^2-m)^l + Bb^l + C, \qquad (29)$$

но коэффициенты уже другие:

$$A = \frac{1}{(b^2-m)^{l_0}}\left[G(l_0) + \frac{D_1 b^{l_0}}{b^2-b-m} + \frac{E}{b^2-m-1}\right]. \qquad (30)$$

Теперь заметим следующее: в формуле (12) $H_2(l-1) = H_2(l_0) = \text{const}$, однако, это не верно для тех графов, которые могут «обходить центральную дырку». Этот обход имеется только на шаге l_0+1 и на следующих шагах, в связи с увеличением размера дырки, не сохраняется.

В связи с этим

$$G(l) = (b^2 - m - \delta(l_0+1))G(l-1) + H(l-1)\,. \tag{31}$$

Если привести эту формулу к виду (15), то коэффициент A примет следующий вид:

$$A = \frac{1}{(b^2-m)^{l_0}}\left[G(l_0) + \frac{G(l_0)}{b^2-m} + \frac{D_1 b^{l_0}}{b^2-b-m} + \frac{D_2}{b^2-m-1}\right], \tag{32}$$

причем H_2 нужно будет взять на единицу меньше.

Заключение

В данной работе показано, что коэффициенты высокотемпературного разложения магнитной восприимчивости модели Изинга для фрактальных решеток бесконечного порядка ветвления удается получить с использованием комбинаторного метода Фабио. Данный способ вычисления критических значения модели Изинга позволяет получить высокую точность интересующих показателей. В частном случае рассмотрены примеры графов для фрактальных решеток, для которых формулы, предложенные в методе Фабио, не корректны. Для этих случаев были выведены соответствующие выражения. Для проверки предложенных формул использовалась написанная нами программная разработка, позволяющая находить критические значения самоподобных решёток на основе метода высокотемпературного разложения. Правильность полученных результатов проверялась с помощью численного алгоритма Монте-Карло, а также данных, опубликованных в литературе [5].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бондаренко А.Н., Селезнев В.А., Харбанова Е.В.* Спектральная асимптотика фрактальных решёток и задачи определения степени усталости материала // Научый вестник НГТУ. Новосибирск: Из-во НГТУ, 2003. № 2. С. 97–106.
2. *Белавин А.А., Кулаков А.Г., Усманов Р.А.* Лекции по теоретической физике. М.: МЦНМО. 2001. 224 с.
3. *Фейнман Р. Лейтон Р.* Фейнмановские лекции по физике. М.: Едиториал УРСС. 2004. 439 с.
4. *Гулд Х. Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1992. 518 с.
5. *Bonnier B. Leroyer Y. Myers C.* High-temperature expansions on Sierpinski carpets // Phys. Rev. 1989. V. 40. No. 13. P. 8961–8966.
6. *Yang Z.R.* Solvable Ising model on Sierpinski carpets: The partition function // Phys. Rev. 1994. V. 49. No. 3. P. 2457 – 2460.
7. *Fabia Aarao Reis D.A., Riera R.* High-temperature series expansion for Ising-like systems on fractals // Phys. Rev. 1994. V. 49. No. 4. P. 2579–2587.

Бондаренко Анатолий Николаевич
Гунькин Андрей Юрьевич
Новосибирский государственный технический университет
E-mail: bondarenkoan1953@mail.ru; shamrock24@mail.ru
Поступила в редакцию 30 апреля 2012 г.

Bondarenko A.N., Gunkin A.Y. (Novosibirsk State Technical University). **Critical phenomena on self-similar lattices.**

Keywords: self-similar lattices, high-temperature expansion, Fabio method.

Recently, methods for computing the number of embeddings of graphs in self-similar structures were proposed, allowing the use of the series-expansion technique for statistical systems on these geometries. In comparison to other techniques, the series-expansion method provides the most reliable results whose accuracy can be improved in a systemic way by increasing the order of the series.

The graph counting method can be used in a fairly general family of self-similar deterministic fractals which are obtained by the iteration of a fixed rule of construction. It enables one to obtain the behavior of statistical system on fractal lattices which have the same fractal dimension but different lacunarities, allowing a complete study of those system on non-Euclidean lattices. In this paper, we apply the graph counting method to find the coefficients of the high-temperature series expansions for the susceptibility of the Ising model on Sierpinski carpets.