



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁRSKA PRÁCA

Oliver Nagy

**Kombinatorické aspekty pojmu
exponenciálna funkcia**

Katedra matematické analýzy

Vedúci bakalárskej práce: doc. RNDr. Miloš Zahradník, CSc.

Študijný program: Fyzika

Študijný odbor: Obecná fyzika

Praha 2017

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne 3.1.2017

Oliver Nagy

Název práce: Kombinatorické aspekty pojmu exponenciální funkce

Autor: Oliver Nagy

Katedra: Katedra matematické analýzy

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Miloš Zahradník, CSc., Katedra matematické analýzy

Abstrakt: Hlavním tématem této práce je technika clusterových rozvoje ve statistické fyzice. Práce je rozdělena do tří částí: v první představíme potřebný matematický aparát - jedná se zejména o některé pojmy z kombinatoriky, teorie grafů a teorie vytvářejících funkcí. Ve druhé představíme clusterové rozvoje a abstraktní polymerový model a ve třetí ukážeme metodu resumace partiční sumy pro tvrdě odpuzivý polymerový model. Při resumaci partiční sumy využíváme vzájemně se anulující členy v partiční sumě k přepisu sumy přes clustery na sumu přes tzv. *prošívané clustery*, případně *svazky*. V této poslední části používáme podle našeho názoru nové metody, potenciálně vedoucí k získání nových, zatím nepublikovaných výsledků.

Klíčová slova: binomická a multinomická formule; mocninné řady; princip inkluze a exkluze; clusterové rozvoje.

Title: Exponential function and Mayer expansion

Author: Oliver Nagy

Department: Department of Mathematical Analysis

Supervisor: doc. RNDr. Miloš Zahradník, CSc., Department of Mathematical Analysis

Abstract: The unifying topic of this thesis is cluster expansion in statistical physics. It is divided into three chapters. In the first one we present the necessary mathematical apparatus — selected topics from combinatorics, graph theory and theory of generating functions. The second one is an introduction to cluster expansion and abstract polymer model. Finally, in the third chapter we show a new resummation method for partition function of hard-core repulsive abstract polymer model. In this resummation we make use of cancellations of terms in partition function to rewrite the sum of clusters to a sum of *quilted* clusters, or alternatively as a sum of *bunches*. The methods we use in this final chapter are original and may lead to some new results.

Keywords: binomial and multinomial formula; power series; inclusion-exclusion principle; cluster expansion.

Názov práce: Kombinatorické aspekty pojmu exponenciálna funkcia

Autor: Oliver Nagy

Katedra: Katedra matematické analýzy

Vedúci bakalárskej práce: doc. RNDr. Miloš Zahradník, CSc., Katedra matematické analýzy

Abstrakt: Hlavnou témou tejto práce je technika clusterových rozvojev v štatistickej fyzike. Práca je rozdelená do troch častí: v prvej predstavíme potrebný matematický aparát – jedná sa najmä o niektoré pojmy z kombinatoriky, teórie grafov a teórie vytvorujúcich funkcií. V druhej predstavíme clusterové rozvoje a abstraktný polymérový model a v tretej ukážeme metódu resumácie partičnej sumy pre tvrdo odpudivý polymérový model. Pri resumácii partičnej sumy využijeme vzájomne sa rušiacie členy v partičnej sume k prepisu sumy cez clustre na sumu cez tzv. prešité clustre, prípadne zväzky. V tejto poslednej časti používame podľa nášho názoru nové metódy, potenciálne vedúce k získaniu nových, zatiaľ nepublikovaných výsledkov.

Kľúčové slová: binomická a multinomická formula; mocninné rady; princíp inklúzie a exklúzie; clusterové rozvoje.

Obsah

Úvod	2
1 Matematický aparát	4
1.1 Kombinatorika	4
1.1.1 Princíp inklúzie a exklúzie	4
1.1.2 Multinomická veta	5
1.2 Teória grafov	6
1.3 Exponenciálne vytvorujúce funkcie	8
1.4 Penroseova identita	10
2 Clusterové rozvoje	13
2.1 Clusterový rozvoj v klasickom grandkanonickom súbore	13
2.2 Abstraktný polymérový model	16
2.2.1 Konvergencia partičnej sumy	18
3 Resumácia partičnej sumy	20
3.1 Prešívajúci polymérový model	21
3.1.1 Pomocné usporiadanie mriežky	22
3.2 Alternatívny pohľad na pojem prešitého clusteru	24
3.3 Využitie a interpretácia resumačnej metódy	25
Záver	28
Zoznam použitej literatúry	29
Zoznam použitých skratiek	31

Úvod

Predmetom tejto práce je štatistická fyzika, konkrétne technika clusterových rozvojev. Tento dôležitý nástroj, spadajúci pod tzv. rigorózne perturbačné techniky v štatistickej fyzike, síce nie je súčasťou základných kurzov, ale každý fyzik pozná aspoň jeden z výsledkov, ktorý sa dá pomocou neho rigorózne získať – van der Waalsovú stavovú rovnicu.

Použitie clusterových rozvojev ale nekončí pri stavových rovniciach neideálneho plynu. Zavedieme si abstraktný polymérový model na mriežke, a jeho clusterový rozvoj. Na abstraktný polymérový model sa potom dajú previesť niektoré dôležité fyzikálne modely, napr. Isingov model, ale jednoduchšie modely, ako napríklad determinant matice Laplaciánu.

Charakter prvých dvoch kapitol je najmä kompilačný. Naším cieľom je poskytnúť čitateľovi ľahko prístupný, stručný úvod do problematiky clusterových rozvojev v klasickej, nekvantovej štatistickej fyzike. Na základe rešerše literatúry si dovoľíme tvrdiť, že takýchto textov je relatívne málo:

- Štandardne citovaný text je [Bry84], ktorý je ale podľa nášho názoru iba ťažko prístupný nováčikom v danej problematike.
- Omnoho čitateľnejší je článok [Sok99], ktorý autor adresuje širokému spektru odborníkov v matematike a štatistickej fyzike. Vzhľadom k širokému zamýšľanému okruhu čitateľov je tento článok bohatý na definície a vety z rôznych oblastí matematiky, čo bohužiaľ vedie k jeho dĺžke – cez 100 strán.
- Alternatívny pohľad pomocou tzv. *combinatorial species* ponúka článok [Far10].
- Krátky úvod sa dá nájsť takisto v *Encyclopædia of Mathematical Physics* [Kot06].

V závere tejto práce predstavujeme novú metódu resumácie partičnej sumy tzv. tvrdo odpudivého polymérového modelu, ktorá využíva veľké množstvo vzájomne sa vyrušujúcich príspevkov v tejto sume. Nie je nám známe, že by túto, alebo podobnú metódu použili iní autori. Myslíme si, že pomocou tejto metódy je možné pochopiť výnimočné postavenie tzv. exaktne riešiteľných modelov v štatistickej fyzike. Patrí sem napríklad Onsagerovo riešenie Isingovho modelu, alebo spomínaný determinant matice Laplaciánu.

Práca je rozdelená na tri kapitoly:

- V prvej predstavíme niektoré pojmy z diskkrétnej matematiky (exponenciálne generujúce funkcie, „exponenciálna formula“, stromové identity ...), ktoré budeme využívať v ďalších kapitolách.

- V druhej časti aplikujeme aparát z prvej časti a predstavíme si clusterové rozvoje a polymérové modely.
- Nakoniec v tretej časti si predstavíme našu novú resumačnú metódu pre tvrdo odpudivý polymérový mriežkový model.

Pri tvrdeniach v kompilačnej časti zriedkavo uvádzame kompletný dôkaz, väčšinou odkazujeme čitateľa na ďalšiu literatúru, ktorá o danej téme pojednáva a daný dôkaz obsahuje.

Čitateľa takisto chceme upozorniť na zoznam skratiek na konci tejto práce, ktorý môže pomôcť pri orientácii v značení.

Kapitola 1

Matematický aparát

Cieľom tejto kapitoly je stručne predstaviť matematický aparát potrebný v ďalších kapitolách. Jedná sa najmä o niektoré pojmy z kombinatoriky, vytvorených funkcií a teórie grafov.

1.1 Kombinatorika

Z kombinatoriky si predstavíme dva elementárne výsledky. Jedná sa o *princíp inklúzie a exklúzie* a *multinomickú formulu*.

1.1.1 Princíp inklúzie a exklúzie

Veta 1 (Princíp inklúzie a exklúzie, [MN09], str. 101). *Pre každý súbor konečných množín $A_1, A_2 \dots A_n$ platí*

$$\left| \bigcup_{i=1}^n A_i \right| = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \sum_{I \in \binom{\{1,2,\dots,n\}}{k}} \left| \bigcap_{i \in I} A_i \right|. \quad (1.1)$$

Význam tejto vety je zrejmý, akonáhle si ju napíšeme pre zopár malých n . Pre $n = 2, 3$ sa jedná o nasledujúce vzťahy:

- $n = 2$:

$$|A_1 \cup A_2| = \sum_{I \in \binom{\{1,2\}}{1}} \left| \bigcap_{i \in I} A_i \right| - \sum_{I \in \binom{\{1,2\}}{2}} \left| \bigcap_{i \in I} A_i \right| = |A_1| + |A_2| - |A_1 \cap A_2| \quad (1.2)$$

- $n = 3$:

$$|A_1 \cup A_2 \cup A_3| = |A_1| + |A_2| + |A_3| - |A_1 \cap A_2| - |A_1 \cap A_3| - |A_2 \cap A_3| + |A_1 \cap A_2 \cap A_3| \quad (1.3)$$

a analogicky pre väčšie n .

Dôkaz tejto vety sa dá vykonať rôznymi spôsobmi, napr. indukciou cez počet množín, alebo pomocou charakteristických funkcií jednotlivých množín. Tri dôkazy aj s komentárom sú uvedené v učebnici [MN09].

Omnoho zaujímavejšie než dôkaz tejto vety sú príklady, ktoré sa nám pomocou nej podarí elegantne vyriešiť. Asi najznámejší netriviálny príklad je nasledujúci:

Príkklad. Nech $A = \{1, 2, \dots, n\}$ je n -prvková množina a $\pi(A)$ je náhodná permutácia množiny A . Aká je pravdepodobnosť, že $\pi(A)$ nemá pevný bod?¹

Aplikujme princíp inklúzie a exklúzie. Zaujímá nás hodnota

$$\text{Prob}_{bpb} = \frac{N_{bpb}}{n!},$$

kde N_{bpb} je počet permutácií n -prvkovej množiny bez pevného bodu a $n!$ je počet všetkých permutácií n -prvkovej množiny. Ako ale zistíme počet permutácií bez pevného bodu?

Skúsme najprv zistiť počet permutácií s aspoň jedným pevným bodom. To je jednoduché, keďže zafixujeme pevný bod: na zvyšných $n - 1$ prvkoch množiny môžeme permutácie vyberať bez obmedzení. Jedná sa teda o počet permutácií $(n - 1)$ -prvkovej množiny, a to je $(n - 1)!$. Aký je počet permutácií s aspoň 2 pevnými bodmi? Podobnou úvahou ako v prípade jedného pevného bodu dôjdeme k číslu $(n - 2)!$ pre prípad, keď fixujeme polohu dvoch pevných bodov.

Zavedme pre množinu permutácií s pevným bodom $a \in A$ označenie Π_a . Vieme už, že $|\Pi_a| = (n - 1)!$. Množina permutácií s pevnými bodmi $a, b \in A$, označme ju $\Pi_{a,b}$, vyzerá ako $\Pi_{a,b} = \Pi_a \cap \Pi_b$. Zároveň vieme, že $|\Pi_{a,b}| = (n - 2)!$. Analogicky si môžeme vyjadriť počet permutácií s k pevnými bodmi, $k \leq n$.

Teraz už nezostáva nič iné, než použiť princíp inklúzie a exklúzie. Dostávame:

$$|\Pi_1 \cup \dots \cup \Pi_n| = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \binom{n}{k} (n - k)! = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \frac{n!}{k!}$$

Počet permutácií bez pevného bodu dostaneme ako

$$N_{bpb} = n! - |\Pi_1 \cup \dots \cup \Pi_n| = n! \left(1 - 1 + \frac{1}{2} - \dots + \frac{(-1)^n}{n!} \right).$$

Hľadaná pravdepodobnosť je teda

$$\text{Prob}_{bpb} = \left(1 - 1 + \frac{1}{2} - \dots + \frac{(-1)^n}{n!} \right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{e}$$

1.1.2 Multinomická veta

Začnime najprv špeciálnym prípadom, známym už zo strednej školy:

Veta 2 (Binomická veta, [MN09], str. 79). *Pre $n \in \mathbb{N}$ platí*

$$(1 + x)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k.$$

Dôkaz. Indukciou cez n a použitím vzorca na súčet kombinačných čísel², vid' [MN09]. \square

Samotná multinomická veta má nasledujúce znenie

¹Táto úloha je známa aj ako tzv. problém šatnárky, vid' [MN09].

²občas zvaný Pascalova identita

Veta 3 (Multinomická veta, [MN09], str. 81). *Pre ľubovoľné čísla $x_1, \dots, x_k \in \mathbb{R}$ a ľubovoľné $n \geq 1$ celé platí rovnosť*

$$(x_1 + \dots + x_k)^n = \sum_{\substack{k_1 + \dots + k_m = n \\ k_1, \dots, k_m \geq 0}} \binom{n}{k_1, \dots, k_m} x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_m^{k_m}.$$

Dôkaz. Analogický dôkazu binomickej vety. Dá sa postupovať aj indukciou cez n a použitím súčtového vzorca pre m kombinačných čísiel. Elegantnejšie je interpretovať výbery členov zo zátvoriek ako úlohu o ofarbení množiny $(1, \dots, n)$ pomocou m farieb tak, aby j -tu farbu dostalo k_j bodov. Znova vid'. [MN09]. \square

1.2 Teória grafov

Pod grafom si predstavíme množinu bodov so spojnicami medzi práve dvomi bodmi. Ako konkrétny príklad nám môže poslúžiť napr. jednoduchý elektrický obvod, kde spojnice sú vodiče a jednotlivé body sú prípojné body použitých súčiastok. Nebudeme pripúšťať mnohonásobné spojenia a ani slučky začínajúce a končiacie v rovnakom bode. Zapíšme si túto názornú predstavu formálne:

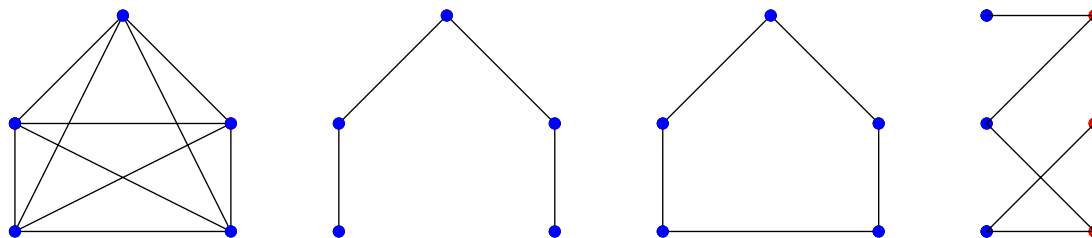
Definícia 1 (Graf, podgraf). *Nech \mathcal{V} je neprázdna konečná množina a nech \mathcal{E} je množina neusporiadaných dvojíc prvkov z \mathcal{V} . Dvojicu $g = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ nazveme (jednoduchý)³ graf s množinou vrcholov \mathcal{V} a množinou hrán \mathcal{E} . Graf $g_1 = (\mathcal{V}_1, \mathcal{E}_1)$ taký, že $\mathcal{V}_1 \subseteq \mathcal{V}$ a $\mathcal{E}_1 \subseteq \mathcal{E}$ nazveme podgraf grafu \mathcal{G} , značíme $g_1 \in g$*

Na všeobecný graf kladieme vcelku málo požiadaviek, čo môže viesť ku komplikovaným objektom. Väčšinou sa preto pracuje s nejakými špeciálnymi grafmi, ktoré majú vhodné vlastnosti. Príkladmi týchto špeciálnych grafov sú:

- úplný graf K_n : $\mathcal{V} = \{1, \dots, n\}$, $\mathcal{E} = \binom{\mathcal{V}}{2}$.
- cesta P_n : $\mathcal{V} = \{1, \dots, n\}$, $\mathcal{E} = \{(i, i + 1) \mid i = 1, \dots, n - 1\}$.
- cyklus C_n : $\mathcal{V} = \{1, \dots, n\}$, $\mathcal{E} = \{(i, i + 1) \mid i = 1, \dots, n - 1\} \cup \{(1, n)\}$, $n \geq 3$.
- bipartitný graf B : $\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 \cup \mathcal{V}_2$, $\mathcal{E} = \{(v_1, v_2) \mid v_1 \in \mathcal{V}_1, v_2 \in \mathcal{V}_2\}$, $\mathcal{V}_1 \cap \mathcal{V}_2 = \emptyset$.

Na vyjasnenie si jednotlivých pojmov pomôže nasledujúci obrázok:

³Táto definícia pripúšťa mnohé zovšeobecnenia. Ak je napr. \mathcal{E} množina usporiadaných dvojíc, tak hovoríme o orientovanom grafe.



Obr. 1.1: Zľava doprava: úplný graf K_5 , cesta P_5 , cyklus C_5 , bipartitný graf B

Ďalšia pre nás dôležitá vlastnosť je súvislosť grafu — teda možnosť prechádzať medzi ľubovoľnými vrcholmi grafu po hranách tohto grafu. Formálne:

Definícia 2 (Súvislý graf). *Graf g nazveme súvislý, ak medzi každými dvoma jeho vrcholmi existuje cesta, ktorá je podgrafom g .*

Všimnime si, že na obr. 1.1 sú všetky grafy súvislé. Pre úplné grafy, cesty a cykly je to vlastnosť celej triedy týchto grafov. Bipartitné grafy pre zmenu môžu byť nesúvislé, napr. bipartitný graf z obr. 1.1 bez spodnej vodorovnej hrany. Medzi súvislými grafmi majú prominentné postavenie stromy.

Definícia 3 (Strom). *Strom je súvislý graf, v ktorom medzi každými dvoma vrcholmi existuje práve jedna cesta.*

Existuje viacero ekvivalentných charakterizácií stromov, ktoré zhrnie nasledujúce tvrdenie:

Tvrdenie 1 (Ekvivalentná charakterizácia stromu). *Nasledujúce výroky sú ekvivalentné*

- g je strom.
- g je súvislý graf, v ktorom medzi každými dvoma vrcholmi existuje práve jedna cesta.
- g je minimálny⁴ súvislý graf na danej množine vrcholov.
- g je maximálny graf na danej množine neobsahujúci cyklus ako podgraf.
- g je súvislý graf s n vrcholmi a $(n - 1)$ hranami

Na vysvetlenie znovu prikladáme obrázok, viď. obr. 1.2

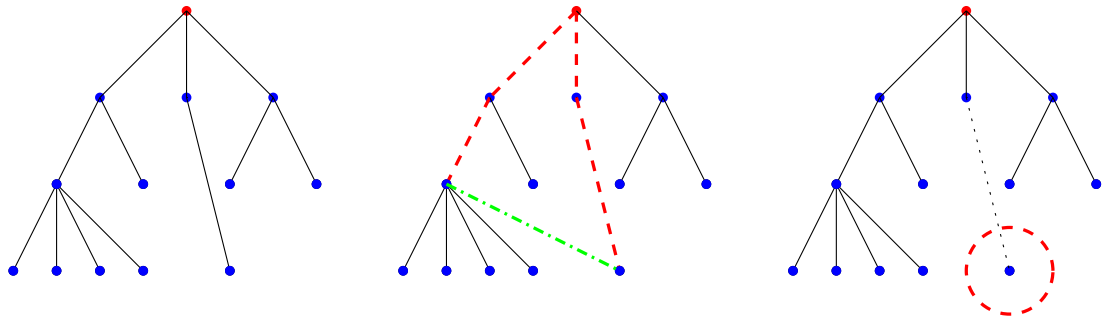
Ku každému súvislému grafu môžeme nájsť jeho podgraf, ktorý je strom. Tento podgraf nie je určený jednoznačne a nazýva sa kostra grafu.

Definícia 4 (Kostra súvislého grafu⁵). *Nech g je súvislý graf s množinou vrcholov \mathcal{V}_g . Strom K , ktorého množina vrcholov je taktiež \mathcal{V}_g nazveme kostrou grafu g .*

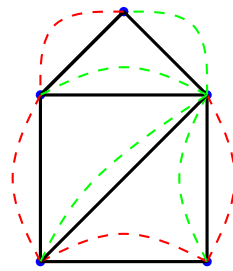
Definícia 5 (Ohodnotenie hrán grafu). *Nech g je graf a \mathcal{E} je jeho množina hrán. Zobrazenie $w : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{C}$ nazveme (komplexné) ohodnotenie hrán grafu g .*

⁴čo do počtu hrán

⁵ang. spanning tree



Obr. 1.2: Vľavo je príklad stromu. Červenou farbou sme označili tzv. koreň stromu. Všimnime si, že každý vrchol okrem koreňa prispieva jednou hranou. V strede sme do tohto stromu pridali zelenú hranu, čím sme z farebných hrán vytvorili cyklus. Vpravo sme čiarkovanú hranu odobrali, čo zapríčinilo, že neexistuje cesta medzi zakrúžkovaným vrcholom a zvyškom grafu.



Obr. 1.3: Graf s piatimi vrcholmi, a jeho dve kostry — červená a zelená.

1.3 Exponenciálne vytvorujúce funkcie

Vytvorujúce funkcie sú jedným zo spôsobov, ako je možné systematicky pracovať s nekonečnými postupnosťami. Jedná sa o tzv. formálne mocninné rady

Definícia 6 (Formálny mocninný rad). Výraz $\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$, kde a_n sú prvky postupnosti komplexných čísel $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ nazveme formálny mocninný rad s koeficientami a_n .

Rozdiel medzi mocninnými radmi známymi z kurzu analýzy a formálnymi mocninnými radmi spočíva v tom, že sa obvykle nezaobráme otázkou ich konvergencie.

Formálne mocninné rady tvoria komutatívny okruh:

Tvrdenie 2. Množina všetkých formálnych mocninných radov s operáciami:

- sčítanie, definované ako $\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n + \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n + b_n) x^n$, s nulovým prvkom 0.
- (cauchyovské) násobenie, definované ako $\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \times \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n a_k b_{n-k} \right) x^n$, s neutrálnym prvkom 1.

tvorí komutatívny okruh.

Dôkaz. Overením definície, viď. napr. [Sta97]

□

Využitím formálnych mocninných radov môžeme zaviesť kompaktný spôsob, ako pracovať s nekonečnými postupnosťami čísiel – zadáme mocninný rad, ktorého koeficienty tvoria spomínanú danú číselnú postupnosť. Toto je myšlienka za vytvorenými (generujúcimi) funkciami. Formálne mocninné rady prevádzajú cauchyovský súčin (teda diskretnú konvolúciu) na násobenie, čo je veľmi dôležitá vlastnosť, ktorá má svoju analógiu v teórii Fourierových radov a Fourierovej transformácie.

Definícia 7 (Vytvorujúca funkcia, exponenciálna vytvorujúca funkcia). *Nech $\{c_n\}_{n=0}^{\infty}$ je nekonečná postupnosť komplexných čísiel. Obyčajná vytvorujúca funkcia postupnosti $\{c_n\}$ je mocninná rada $F_c = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$. Exponenciálna vytvorujúca funkcia postupnosti $\{c_n\}$ je mocninná rada $E_c = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{x^n}{n!}$.*

Pomocou vytvorených funkcií je možné elegantne riešiť mnohé kombinatorické problémy. Úvod do ich použitia ponúka napr. učebnica [MN09]. Priamo na vytvorené funkcie sa zameriava učebnica [Wil13], ktorá obsahuje aj značné množstvo riešených príkladov. Výrazne pokročilejší text ohľadne použitia vytvorených funkcií je [Sta97].

Ukazuje sa ale, že exponenciálne vytvorené funkcie môžu nájsť svoje použitie aj vo fyzike. Konkrétne nás zaujíma tzv. exponenciálna formula, ktorú neskôr využijeme na prepis partičnej funkcie polymérového modelu. Na túto vetu sa dá pozeráť rôznymi spôsobmi: buď je to vcelku špeciálna verzia formuly Faá di Bruna⁶, alebo sa na to dá pozeráť ako na všeobecnú vetu o skladaní vytvorených funkcií. V našom konkrétnom prípade to znamená, že budeme schopný nájsť vzťah medzi sumou cez všetky grafy na nejakej množine $\{1, \dots, n\}$ a sumou cez všetky súvislé grafy na tejto množine.

Začnime všeobecnejšou formulou pre skladanie exponenciálnych generujúcich funkcií:

Veta 4 (O skladaní EGF). [Sta97], [Wil13]

Nech $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} x^n$ a $g(x) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m}{m!} x^m$ sú exponenciálne vytvorené funkcie. Potom $h(x) = g(f(x)) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{n!} x^n$, kde pre koeficienty platí

$$c_n = \sum_{\substack{\text{rozklady} \\ \pi = \{P_1, P_2, \dots, P_k\}}} a_{|P_1|} a_{|P_2|} \dots a_{|P_k|} b_k, \quad (1.4)$$

kde suma prebieha cez všetky rozklady množiny $\{1, 2, \dots, n\}$ do častí P_1, \dots, P_k , pričom $|P_i|$ značí počet prvkov v i -tej časti.

Dôkaz. V literatúre je možné dohľadať viacero dôkazov: v [Bry84] sa toto tvrdenie dokazuje pomocou multinomickej vety, v [Wil13] sa vybuduje všeobecnejšia teória pre označené objekty na n -prvkových množinách a využíva sa pojem tzv. exponenciálneho systému⁷ a veta sa dokáže pomocou manipulácie s exponenciálnymi vytvorenými funkciami rôznych exponenciálnych systémov. \square

⁶formula udávajúca tvar n -tej derivácie zloženej funkcie

⁷ang. *exponential family*

Ak v tejto vete špeciálne volíme $g(x) = \exp(x)$, tak dostávame exponenciálnu formulu.

Tvrdenie 3 (Exponenciálna formula). *Nech $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} x^n$ a $g(x) = \exp(x)$ sú exponenciálne vytvorujúce funkcie. Potom $h(x) = \exp(f(x)) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{n!} x^n$, kde pre koeficienty platí*

$$c_n = \sum_{\substack{\text{rozklady} \\ \pi = \{P_1, P_2, \dots, P_k\}}} a_{|P_1|} a_{|P_2|} \dots a_{|P_k|}. \quad (1.5)$$

Poznámka. Podobné tvrdenie platí aj pre funkcie $g(X)$ viacerých premenných.

1.4 Penroseova identita

Veta 5 (Penrose, 1964; v znení [PY15]). *Nech \mathcal{C}_n je množina všetkých súvislých grafov s vrcholmi $\mathcal{V} = \{1, \dots, n\}$, \mathcal{T}_n je množina všetkých stromov na vrcholoch \mathcal{V} a pre $g \in \mathcal{C}_n$ nech \mathcal{E}_g značí množinu všetkých hrán grafu g .*

Ďalej nech existujú zobrazenia:

$$T : \mathcal{C}_n \rightarrow \mathcal{T}_n$$

$$M : \mathcal{T}_n \rightarrow \mathcal{C}_n$$

také, že $T^{-1}(\tau) = \{g \in \mathcal{C}_n : \tau \subseteq g \subseteq M(\tau)\}$ ⁸ a nech pre $\forall g \in \mathcal{C}_n$ existuje ohodnotenie $h : \mathcal{E}_g \rightarrow \mathbb{C}$.

Potom platí

$$\sum_{g \in \mathcal{C}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_g} (h(e)) = \sum_{\tau \in \mathcal{T}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_\tau} (h(e)) \prod_{e \in \mathcal{E}_{M(\tau)} \setminus \mathcal{E}_\tau} (h(e) + 1). \quad (1.6)$$

Dôkaz. [PY15]

Začnime tým, že preskúmame vzory stromu $T(g)$:

$$T^{-1}(T(g)) = \{a \in \mathcal{C}_n; T(g) \subseteq a \subseteq M(\tau)\}$$

$$\begin{array}{ll} g \in T^{-1}(T(g)) \Rightarrow T(g) \subset g, \forall g \in \mathcal{C}_n & T(g) \text{ je teda kostra } g \\ \text{špeciálne } T(\tau) \subset \tau \Rightarrow T(\tau) = \tau & \text{kde } \tau \text{ je strom} \end{array}$$

Ďalej z definície $T^{-1}(\tau)$ máme, že strom τ je kostrou grafu, na ktorý ho zobrazí zobrazenie $M(\tau)$.

$$\tau \in T^{-1}(\tau) \Rightarrow \tau \subset M(\tau)$$

Keďže zobrazenie $T(g)$ priradí každému súvislému grafu práve jeden strom, môžeme na \mathcal{C}_n nahliadať ako na zjednotenie vzorov stromov z \mathcal{T}_n .

$$\mathcal{C}_n = \bigcup_{\tau \in \mathcal{T}_n} T^{-1}(\tau).$$

⁸označením $T^{-1}(\tau)$ myslíme množinu vzorov stromu τ

Upravujme nasledujúci výraz:

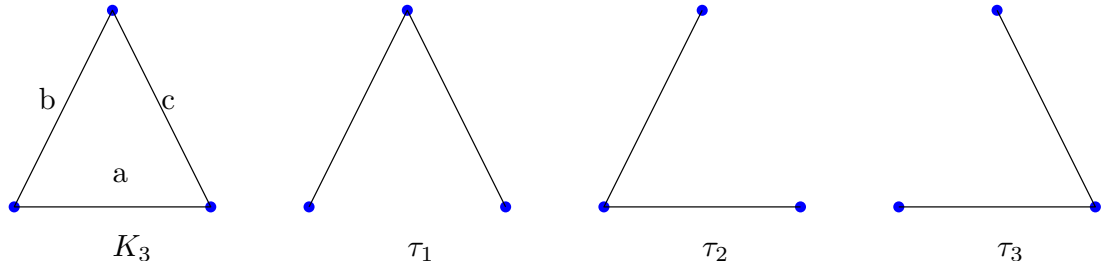
$$\begin{aligned} \sum_{g \in \mathcal{G}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_g} h(e) &= \sum_{\tau \in \mathcal{T}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_\tau} h(e) \sum_{\substack{g \in \mathcal{G}_n \\ \tau \subset g \subset M(\tau)}} \prod_{e \in \mathcal{E}_g \setminus \mathcal{E}_\tau} h(e) = \\ &= \sum_{\tau \in \mathcal{T}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_\tau} h(e) \prod_{e \in \mathcal{E}_{M(\tau)} \setminus \mathcal{E}_\tau} (h(e) + 1). \end{aligned}$$

Tieto úpravy si zaslúžia komentár. Na prvom riadku prepisujeme sumu cez všetky súvislé grafy zo súčinu ohodnotení hrán tohto grafu na analogický súčet cez stromy, ale so zmenenými váhami. Tieto váhy násobíme faktorom $\sum_{\substack{g \in \mathcal{G}_n \\ \tau \subset g \subset M(\tau)}} \prod_{e \in \mathcal{E}_g \setminus \mathcal{E}_\tau} h(e)$.

Tento faktor má tvar $(1 + \dots)$, pričom jednotka pochádza z voľby $g = \tau$ a reprezentuje príspevok stromu do sumy cez súvislé grafy a ďalšie členy reprezentujú príspevok grafov, ktoré by vznikli z daného stromu pridaním príslušných hrán. V ďalšom kroku tento faktor zjednodušíme použitím grafu $M(\tau)$, čo je z definície množiny $T^{-1}(\tau)$ „najväčší“⁹ vzor stromu τ . Roznásobením zátvoriek v druhom súčine na druhom riadku dostaneme úplne rovnaký výraz ako v predchádzajúcom kroku, čo ukončuje dôkaz. \square

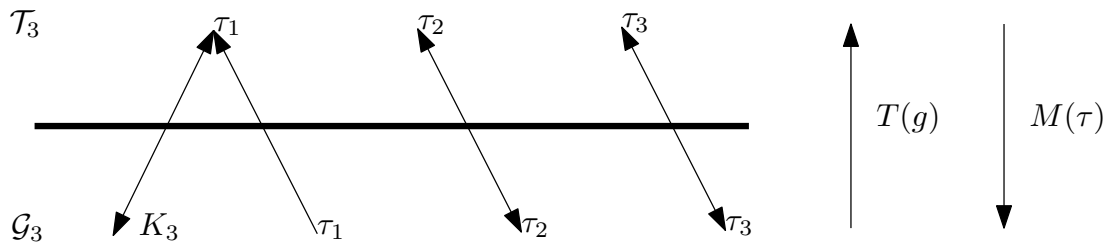
Príklad. Overme teraz túto vetu pre $n = 3$.

Existujú práve štyri súvislé grafy na trojprvkovej množine, K_3 a jeho tri rôzne kostry. Ohodnotíme hrany K_3 číslami $a, b, c \in \mathbb{C}$, viď. obr. 1.4



Obr. 1.4: Súvislé grafy na trojprvkovej množine. Ohodnotenie hrán je naznačené na úplnom grafe K_3 , jednotlivé grafy sú označené značkou pod nimi

Ďalej si musíme vhodne zdefinovať zobrazenia T a M , aby vyhovovali predpokladom na T^{-1} . Našu voľbu zobrazení sme znázornili na obr. 1.5



Obr. 1.5: Voľba zobrazení T a M v súlade s predpokladmi Penroseovej identity.

⁹voči usporiadaniu danému reláciou „byť podgraf“

Ako teda vyzerá suma z ľavej strany rovnice (1.6)?

$$\sum_{g \in \mathcal{G}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_g} (h(e)) = abc + bc + ba + ac$$

Túto sumu prepíšeme pomocou sumy cez stromy s upravenými váhami. Dostávame

$$\sum_{\tau \in \mathcal{T}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_\tau} h(e) = \sum_{\substack{g \in \mathcal{G}_n \\ \tau \subset g \subset M(\tau)}} \prod_{e \in \mathcal{E}_g \setminus \mathcal{E}_\tau} h(e) = (ab \times 1) + (ac \times 1) + (bc \times (1 + a)),$$

čo je to isté ako

$$\sum_{\tau \in \mathcal{T}_n} \prod_{e \in \mathcal{E}_\tau} h(e) \prod_{e \in \mathcal{E}_{M(\tau)} \setminus \mathcal{E}_\tau} (h(e)+1) = (ab \times 1) + (ac \times 1) + (bc \times (1+a)) = abc + ab + ac + bc.$$

V tomto prípade sa síce mnohé úvahy extrémne zjednodušili, ale vzhľadom k rastu počtu súvislých grafov v závislosti od počtu vrcholov (viď. [OEoIS]) už aj pre $n = 4$ by bolo problematické rozpísať význam tejto vety takto názorne.

Kapitola 2

Clusterové rozvoje

V tejto kapitole predstavíme clusterové rozvoje v klasickej rovnovážnej štatistickej fyzike. Clusterové rozvoje vznikli v prvej polovici 20. storočia v práci [MM41], pričom si neskôr našli svoje uplatnenie aj v iných partiách fyziky, najmä v kvantovej teórii poľa (viď. [GJ87]).

Najprv predstavíme clusterové rozvoje vo všeobecnosti. Následne sa zameriame na špeciálny polymérový model na mriežke, ktorým sa budeme zaoberať až do konca práce.

2.1 Clusterový rozvoj v klasickom grandkanonickom súbore

V tejto časti predstavíme clusterový rozvoj pre všeobecný systém klasických častíc. Čerpáme najmä z prehľadových článkov [Kot06], [Bry84]

Uvažujme systém s Hamiltoniánom

$$H(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i,j=1}^N \Phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j). \quad (2.1)$$

Ďalej predpokladajme, že potenciál Φ má nasledujúce vlastnosti:

- je stabilný – existuje $B \geq 0$ také, že $\sum_{i,j=1}^n \Phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \geq -Bn$ pre všetky $n \leq N$ a všetky vektory v \mathbb{R}^{3N} . Znamená to, že do konečného objemu nie je možné umiestniť nekonečné množstvo častíc.
- je regulárny – platí $\int |\exp(-\beta\Phi(\vec{r})) - 1| d^3\vec{r} < \infty$ pre všetky $\beta > 0$.

Tieto podmienky požadujeme preto, aby nám integrály, ktoré dostaneme v nasledujúcich výpočtoch zkonvergovali. Takýto systém má grandkanonickú partičnú sumu Z danú ako

$$Z(\beta, \lambda, V) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \int_{\mathbb{R}^{3N} \times V^N} \exp(-\beta H) \frac{1}{h^{3N}} \prod_i d^3\vec{p}_i \prod_i d^3\vec{r}_i, \quad (2.2)$$

kde $z = \exp(\beta\mu)$ je tzv. „únikový faktor“¹. Táto rovnica sa pre konkrétny Hamiltonián (2.1) upraví na tvar

$$Z(\beta, \lambda, V) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\lambda^N}{N!} \int_{V^N} \exp(-\beta \sum_{i,j} \Phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \prod_i d^3\vec{r}_i, \quad (2.3)$$

kde faktor $\lambda = z \left(\frac{2\pi m}{\beta \hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}}$ zahrňuje príspevky získané z integrácie cez impulzy a nazýva sa konfiguračná aktivita.

Naším cieľom je získať výraz pre logaritmus tejto partičnej sumy. Začnime tým, že zavedieme Mayerov faktor $f(\vec{r})$ ako

$$f(\vec{r}) = \exp(-\beta\Phi(\vec{r})) - 1. \quad (2.4)$$

Pokračujme s týmto „triviálnym“ prepisom partičnej sumy

$$Z(\beta, \lambda, V) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\lambda^N}{N!} \int_{V^N} \prod_{i,j=1}^N (1 + f(\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \prod_i d^3\vec{r}_i. \quad (2.5)$$

Hlavným pozorovaním je, že ak budeme polohy jednotlivých častíc považovať za množinu vrcholov, tak partičnú sumu môžeme preorganizovať ako sumu cez všetky grafy na množine $(1, 2, \dots, N)$, čím dostaneme

$$Z(\beta, \lambda, V) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\lambda^N}{N!} \sum_{g \in \mathcal{G}_{N^N}} \int \prod_{e \in \mathcal{E}_g} f(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \prod_i d^3\vec{r}_i = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\lambda^N}{N!} \sum_{g \in \mathcal{G}_N} w(g), \quad (2.6)$$

kde sme koniec partičnej sumy označili ako váhu grafu $w(g)$. Akonáhle si uvedomíme, že váha (všeobecne nesúvislého) grafu je súčinom váh jeho rozkladu do súvislých komponent, prepíšeme partičnú sumu do finálneho tvaru

$$Z(\beta, \lambda, V) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\lambda^N}{N!} \sum_{\substack{\text{rozklady } \mathcal{G}_N \\ \text{do súvislých komponent} \\ \{c_n\}}} \prod_n w(c_n). \quad (2.7)$$

Použitím exponenciálnej formule (Tvrdenie 3, vo verzii pre funkcie viacerých premenných) dostávame formálne vyjadrenie logaritmu partičnej funkcie ako

$$\log Z(\beta, \lambda, V) = \sum_{M=1}^{\infty} \frac{\lambda^M}{M!} \sum_{c \in \mathcal{C}_M} w(c). \quad (2.8)$$

Príkladom použitia clusterového rozvoja grandkanonickej partičnej sumy (2.7) je odvodenie van der Waalsovej stavovej rovnice (viď. napr. [Uel]).

Príklad. Zadefinujme tlak p ako

$$p = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta|V|} \log Z(\beta, \lambda, V) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta|V|} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\lambda^N}{N!} \sum_{c \in \mathcal{C}_N} w(c), \quad (2.9)$$

¹anglicky *fugacity*

čo sa v limite rovná

$$p = \frac{1}{\beta} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\lambda^N}{N!} \sum_{g \in \mathcal{G}_N \mathbb{R}^N} \int \prod_{e \in \mathcal{E}_g} f(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \prod_i d^3 \vec{r}_i. \quad (2.10)$$

Začnime sa postupne pozeráť na jednotlivé členy zo sumy (2.10). Pre $N=1$ dostávame, že

$$p_1 = \frac{\lambda}{\beta} = \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right)^{\frac{2}{3}} \exp(\beta\mu), \quad (2.11)$$

z čoho využitím definície mernej hustoty častíc

$$n = \left. \frac{\partial p}{\partial \mu} \right|_{\beta} \quad (2.12)$$

dostávame stavovú rovnicu ideálneho plynu,

$$p = \frac{n}{\beta} = nk_B T. \quad (2.13)$$

Pokračujme členom $N=2$, a dodajme zopár fyzikálnych predpokladov ohľadne tejto interakcie. Konkrétne predkladajme, že

- jedná sa o tzv. interakcie s tvrdým jadrom, teda existuje nejaká minimálna kladná vzdialenosť, na ktoré môžu byť od seba častice vzdialené. Táto podmienka je ztrivializovaná podmienka stability.
- parameter β je malý, a teda teplota T je vysoká.
- interakcia medzi dvoma časticami ubýva dostatočne rýchlo so vzdialenosťou, aby integrál v (2.16) zkonvergoval. Jedná sa teda o podmienku regularity.

Pre $N=2$ máme súvislé grafy s dvoma vrcholmi a jednou hranou. Dostávame teda výraz

$$p_2 = -\frac{\lambda^2}{2\beta} \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{r}) d\vec{r} = -\frac{\lambda^2}{2\beta} \int_{\mathbb{R}^3} \exp(-\beta\Phi(\vec{r})) - 1 d\vec{r}. \quad (2.14)$$

Teraz využijeme predpoklad, že častice sa k sebe nemôžu priblížiť bližšie než nejaká konštanta R . Dostávame

$$p_2 \approx \frac{4\pi R^3}{3} + \int_{|\vec{r}|>R} \exp(-\beta\Phi(\vec{r})) - 1 d\vec{r} = \frac{4\pi R^3}{3} - \int_{|\vec{r}|>R} 1 - \exp(-\beta\Phi(\vec{r})) d\vec{r}. \quad (2.15)$$

Zavedme teraz dve nové skratky :

$$a = \frac{2\pi R^3}{4}; b = \frac{1}{2\beta} \int_{|\vec{r}|>R} 1 - \exp(-\beta\Phi(\vec{r})) d\vec{r}. \quad (2.16)$$

Dostávame teda, že tlak s započítaním dvojčasticových interakcií má tvar

$$p \approx p_1 + p_2 \approx \frac{\lambda}{\beta} - \frac{\lambda^2}{2\beta} (2b - 2\beta a). \quad (2.17)$$

Využijeme znovu mernú hustotu častíc (2.12), z čoho máme

$$n \approx \beta p_1 + 2\beta p_2. \quad (2.18)$$

Úplne nakoniec, využívajúc aproximáciu $\lambda \approx n$, skratku $v = \frac{1}{n}$ a jednoduché algebraické úpravy dostávame

$$p \approx \frac{n(1 + nb)}{\beta} - n^2 a = \frac{k_B T}{v - b} - \frac{a}{v^2}, \quad (2.19)$$

čo je známa *van der Waalsova* stavová rovnica. V praxi sa parametre a, b určujú experimentálne.

2.2 Abstraktný polymérový model

V minulej kapitole sme si predstavili clusterový rozvoj grandkanonickej partičnej sumy. Vzhľadom k tomu, že samotná idea clusterového rozvoju je použiteľná aj pre iné systémy, tak je vhodné mať k dispozícii vhodný abstraktný model, na ktorý budeme môcť previesť konkrétne fyzikálne modely.

Definícia 8 (Polymérový model). *Nech \mathbb{Z}^d je mriežka a nech $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ je konečná podmnožina tejto mriežky².*

Na Λ nech existujú geometrické objekty Γ_k , $k \in \mathbb{N}$, nazývané polyméry. Pre každý polymér definujme jeho nosič $\text{supp}(\Gamma) \subset \Lambda$.

Zavedme interakčný graf $\mathcal{I} = ((\Gamma_1, \dots, \Gamma_n), \mathcal{E}_{\mathcal{I}})$. Ďalej nech existuje symetrická a reflexívna relácia kompatibility κ , pričom polyméry Γ_1, Γ_2 sú kompatibilné práve vtedy, keď $(\Gamma_1, \Gamma_2) \in \mathcal{E}_{\mathcal{I}}$, inak sú nekompatibilné.

Poznámka. Kompatibilita je štandardne daná prienikom nosičov dvoch polymérov. Ak pre polyméry γ_1, γ_2 platí $\text{supp}(\gamma_1) \cap \text{supp}(\gamma_2) = \emptyset$, tak sú nekompatibilné, inak sú kompatibilné.

Ďalej zavedme špeciálne tzv. tvrdo odpudivý³ polymérový model

Definícia 9 (Tvrdo odpudivý polymérový model). *Polymérový model, v ktorom interakciu jednotlivých polymérov Γ_i opisuje potenciál*

$$\Phi_{hc-hr}(\Gamma_i, \Gamma_j) = \begin{cases} 0 & \text{supp}(\Gamma_i) \cap \text{supp}(\Gamma_j) = \emptyset \\ +\infty & \text{supp}(\Gamma_i) \cap \text{supp}(\Gamma_j) \neq \emptyset \end{cases} \quad (2.20)$$

sa nazve tvrdo odpudivým polymérovým modelom.

Poznámka. Tvrdo odpudivý model sa dá zovšeobecniť na tlmene odpudivý⁴ polymérový model, kde je interakcia popísaná potenciálom

$$\Phi_{hc-hr}(\Gamma_i, \Gamma_j) = \begin{cases} 0 & \text{supp}(\Gamma_i) \cap \text{supp}(\Gamma_j) = \emptyset \\ c(\Gamma_i, \Gamma_j) \in \mathbb{R}^+ & \text{supp}(\Gamma_i) \cap \text{supp}(\Gamma_j) \neq \emptyset. \end{cases} \quad (2.21)$$

Rozdiel voči tvrdo odpudivému prípadu spočíva v tom, že polyméry, ktorých nosiče sa prekrývajú, sa môžu odpudzovať rôznou intenzitou.

Ďalej v práci budeme na označenie tvrdo repulzívneho modelu používať skratku HCR model.

²často volíme aj Λ ako d -rozmerný torus

³ang. *hard-core repulsive*

⁴ang. *soft repulsive*

Partičná funkcia abstraktného polymérového modelu má tvar

$$Z_{pol} = \sum_{\substack{\text{kompatibilné} \\ \text{kolekcie polymérov} \\ \{\Gamma_i\}}} w_{\Gamma_i} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\substack{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N) \\ \text{kompatibilné}}} w_{\Gamma_i}. \quad (2.22)$$

Poznámka. Nahradenie sumy cez neusporiadané kolekcie polymérov sumou cez *usporiadané* kolekcie polymérov je zásadný krok, vďaka ktorému môžeme v nasledujúcich formulách používať konzistentné značenie.

Ďalej chceme napísať partičnú funkciu pre HCR model. Zavedme najprv faktor kompatibility

Definícia 10 (Faktor kompatibility HCR modelu). *V tvrdo odpudivom polymérovom modeli zavádzame faktor kompatibility*

$$\mathfrak{C}(\Gamma_i, \Gamma_j) = \begin{cases} 0 & \text{supp}(\Gamma_i) \cap \text{supp}(\Gamma_j) = \emptyset \\ -1 & \text{supp}(\Gamma_i) \cap \text{supp}(\Gamma_j) \neq \emptyset. \end{cases} \quad (2.23)$$

Potom grandkanonická suma HCR modelu je:

Definícia 11 (Partičná suma HCR modelu).

$$Z_{HCR} = \sum_{\substack{\{\Gamma_i\} \\ \text{kompatibilné kolekcie}}} \prod_i w_{\Gamma_i} = \quad (2.24)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\substack{(\Gamma_i) \\ \text{všetky kolekcie}}} \prod_i w_{\Gamma_i} \prod_{i < j} \mathfrak{C}_{\Gamma_i, \Gamma_j} = \quad (2.25)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N)} \prod_i (w_{\Gamma_i}) \sum_{g \in \mathcal{G}_n} \mathfrak{C}_g, \quad (2.26)$$

pričom faktor kompatibility pre graf definujeme ako

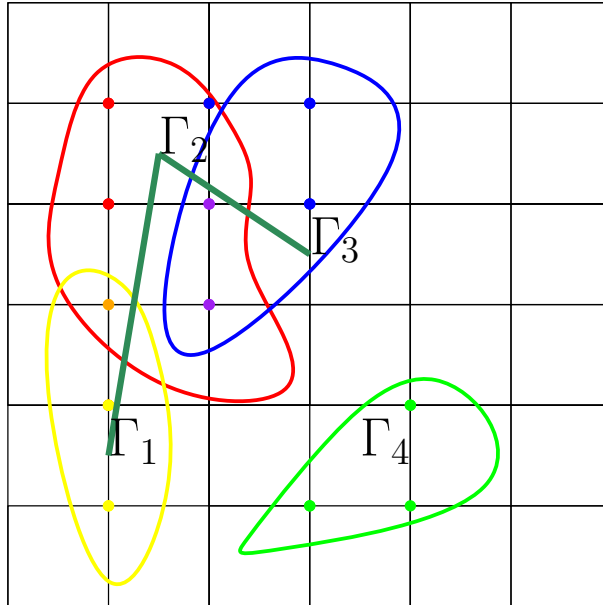
$$\mathfrak{C}_g = \prod_{\{i, j\} \in \mathcal{E}_g} \mathfrak{C}_{\Gamma_i, \Gamma_j}. \quad (2.27)$$

Partičnú sumu sme teda zapísali ako sumu cez všetky interakčné grafy. Úplne analogicky ako v začiatku tejto kapitoly môžeme túto sumu clusterovo rozviesť, čím získame

Veta 6 (Clusterový rozvoj HCR partičnej sumy).

$$\mathcal{Z}_{HCR} = \exp \left(\sum_{M=1}^{\infty} \frac{1}{M!} \sum_{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_M)} \prod_i w_{\Gamma_i} \sum_{c \in \mathcal{C}_n} \mathfrak{C}_c \right). \quad (2.28)$$

Poznámka. Celá táto konštrukcia je analogická clusterovému rozvoju pre klasický plyn, pričom faktor kompatibility plní úlohu Mayerovho faktoru.



Obr. 2.1: Náčrt polymérového modelu na mriežke. Štyri polyméry sme odlišili farbami. Jednotlivým bodom ich nosičov sme priradili farbu polyméru, alebo ak spadajú do prieniku nosičov dvoch polymérov, tak zmes farieb zodpovedajúcich týmto dvom polymérom. Takisto sme tmavozelenou vyznačili graf inkompatibility.

+	+	+	+	+	+	+	+
+	-	+	+	+	+	-	+
+	-	+	+	+	-	+	+
+	+	+	+	+	+	+	+
+	+	+	-	-	-	+	+
+	+	+	-	+	-	+	+
+	+	+	-	-	-	+	+
+	+	+	+	+	+	+	+

Obr. 2.2: Nízokoteplotný 2D Isingov model (na obrázku s okrajovou podmienkou „+“) je taktiež príkladom polymérového modelu, kde polyméry sú tzv. kontúry oddelujúce oblasti rôznych znamienok.

2.2.1 Konvergencia partičnej sumy

Automaticky sa ponúka otázka, kedy je formálny mocninný rad (2.28) konvergentný. Táto otázka sa v minulosti riešila pomocou Kirkwood-Salzburgových integrálnych rovníc, vid'. [D.R63]. Následne sa začali používať kombinatorické identity ako napríklad Penroseova identita (Veta 5) , vid' [LP64]. V literatúre je ale najčastejšie uvádzané Koteckého-Preissovo kritérium [KP86], ktorému sú vcelku podobné Dobrushinovo kritérium [Dob96], prípadne kritérium od Cammarottu [Cam82]. V poslednej dobe získali Procacci a Fernández ďalšie kritérium, ktoré získali použitím Penroseovej identity [FP07]. Článok [FP07] zároveň ob-

sahuje zhrnutie horeuvedených kritérií a ich porovnanie pre niektoré mriežkové modely.

Vo všeobecnosti sa dá povedať, že clusterový rozvoj je konvergentný v oblasti vysokých teplôt, alebo nízkych hustôt, pričom problémy s konvergenciou nastávajú keď sa približujeme k oblasti fázového prechodu.

Kapitola 3

Resumácia partičnej sumy

V poslednej kapitole uvedieme metódu, pomocou ktorej budeme schopný pre-písať partičnú sumu pre HCR polymérový model. Využijeme veľké množstvo vzá-jomných vyrušení sa príspevkov od jednotlivých grafov a takto prepíšeme sumu cez všetky súvislé grafy na sumu cez nové objekty, ktoré v tejto kapitole popíšeme.

Tvrdo odpudivý polymérový model sme zadefinovali v kapitole 2. Na tomto mieste si pripomenieme jeho partičnú sumu, ale narozdiel od kapitoly 2 budeme používať záporné váhy.

Definícia 12 (Partičná suma HCR pol. modelu, v.2). *Partičnú sumu pre tvrdo odpudivý polymérový model definujeme ako*

$$\mathcal{Z}_{HCR} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N)} \prod_i (w_{\Gamma_i}) \sum_{g \in \mathcal{G}_n} \mathfrak{C}_g \quad (3.1)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N)} \prod_i (-\omega_{\Gamma_i}) \sum_{g \in \mathcal{G}_n} \mathfrak{C}_g \quad (3.2)$$

kde faktor kompatibility \mathfrak{C}_g je pre graf g definovaný ako

$$\mathfrak{C}_g = \prod_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_g} \mathfrak{C}_{\Gamma_i, \Gamma_j}, \quad (3.3)$$

Poznámka. Všimnime si, že v partičnej funkcii sme zaviedli *záporné* váhy, ktoré si so sebou nesú znamienko $(-)$. Aby sme tieto dve situácie od seba jasne odlí-šili a čitateľa upozornili, tak na označenie záporných váh použijeme namiesto w písmeno ω . Toto sme spravili preto, že v niektorých rozvojoch nižšie bude mo-žné vytknúť znamienko $(-)$ pred všetky váhy clusterových členov (ktoré budú polynomiálnymi funkciami váh ω s kladnými koeficientami).

Dohodnime sa teda, že

$$w_{\Gamma} = -\omega_{\Gamma}, \quad (3.4)$$

čo bude výhodné neskôr pri definícii váh tzv. prešitých clusterov. Na prvý pohľad môže takáto definícia váh vyzeráť nezmyselne, ale ukazuje sa, že záporné váhy vedú k prehľadnejším situáciám než kladné, fyzikálne váhy.

Túto partičnú sumu môžeme rovnako ako v predchádzajúcej kapitole cluste-rovo rozviesť, vid. veta 6

Partičnú sumu sme teda zapísali ako exponenciálu zo sumy cez súvislé grafy na polyméroch. V ďalšom kroku tento model upresníme a vytvoríme *prešívane* clustre.

3.1 Prešívany polymérový model

Na účely tejto podkapitoly si budeme musieť zaviesť nové pojmy. Začnime tým, že zopakujeme obvyklú definíciu clusteru:

Definícia 13 (Cluster). Cluster \mathcal{C} je množina zložená z kolekcie polymérov $(\Gamma_1, \dots, \Gamma_n)$ a súvislého grafu, ktorého vrcholy sú jednotlivé polyméry a jeho hrany sú podgrafom grafu inkompatibility \mathcal{I} systému $(\Gamma_1, \dots, \Gamma_n)$.

Definíciu clusteru chceme upresniť, a to tak, že identifikujeme konkrétne body zodpovedné za nekompatibilitu dvoch polymérov.

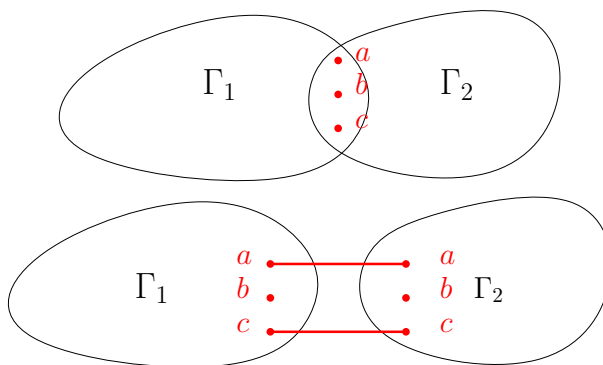
Definícia 14 (Stehový faktor kompatibility). Pre všetky dvojice nekompatibilných polymérov $\{\Gamma_a, \Gamma_b\}$ a im prislúchajúce $\{i \in (\text{supp}(\Gamma_a) \cap \text{supp}(\Gamma_b))\}$ definujeme funkciu

$$\mathfrak{C}(\Gamma_a, \Gamma_b, i) = \begin{cases} -1 & \text{a vravíme, že tieto polyméry sú v bode } i \text{ prešité} \\ 0 & \text{ak tieto dva polyméry nie sú v bode } i \text{ prešité} \end{cases} \quad (3.5)$$

Poznámka. Ak pre nejaký bod i je $\mathfrak{C}(\Gamma_a, \Gamma_b, i)$ definované a rovné nule, tak v tomto bode steh nie je, ale môže byť. Na kolekciu všetkých stehov sa dá pozeráť aj ako na spresnenie informácie danej grafom inkompatibility.

Keď máme zavedený pojem stehu, tak môžeme zaviesť náš ústredný pojem — prešitý cluster:

Definícia 15 (Prešitý cluster). Prešitým clusterom \mathcal{Q} nazývame dvojicu zloženú z kolekcie polymérov $(\Gamma_1, \dots, \Gamma_n)$ a stehov medzi polymérmi volených tak, aby sme dostali súvislý objekt.



Obr. 3.1: Náčrt prešitia dvoch polymérov. Ich prienik obsahuje body a, b, c a prešité sú body a, c .

Poznámka. Pod súvislosťou myslíme takú voľbu stehov, v ktorej existuje cesta po stehoch medzi každou dvojicou polymérov z predmetnej kolekcie.

Na cluster \mathcal{C} je sa dá pozeráť ako na triedu ekvivalencie prešitých clusterov \mathcal{Q} , pričom za ekvivalentné považujeme také prešité clustre, ktoré majú neprázdnu množinou stehov prešité rovnaké dvojice polymérov.

3.1.1 Pomocné usporiadanie mriežky

Ďalej zavádzame pomocné usporiadanie mriežky Λ :

Definícia 16 (Pomocné usporiadanie mriežky). *Na mriežke Λ zavádzame pomocné úplné usporiadanie mriežkových bodov $i \in \Lambda$, ktoré značíme \prec .*

Poznámka. Usporiadaniu \prec všeobecne neprisudzujeme iné vlastnosti ako úplnosť. Máme teda veľkú voľnosť pri jeho výbere a v dôsledku tejto voľnosti nasledujúca konštrukcia výrazne závisí od konkrétneho výberu usporiadania.

Na druhej strane, voľbou konkrétneho – lexikografického – usporiadania dostávame v termodynamickej limite konštrukcie, ktoré sú translačne invariantné, čo je výhodná vlastnosť. V tomto momente nám nie je známe žiadne iné usporiadanie, ktoré by malo takto výhodné vlastnosti.

Bude užitočné, keď budeme môcť hovoriť o úrovni bodu voči usporiadaniu \prec :

Definícia 17 (Úroveň bodu, stehu). *Definujme úroveň bodu ako:*

$$\text{Ind}(\min_{\prec} \Lambda) = 1 \quad (3.6)$$

$$\text{Ind}(\text{succ}_{\prec}(i)) = \text{succ}_{\mathbb{N}}(i) \quad (3.7)$$

Ďalej úroveň stehu definujeme ako úroveň bodu, v ktorom je tento steh realizovaný.

S týmito definíciami môžeme vysloviť nasledujúcu dôležitú lemmu:

Hlavná lemma 1 (O čiastočnej expanzii HCR pol. modelu). *Majme HCR polymérový model. Nech S je zjednotenie nosičov všetkých polymérov uvažovaného modelu. Nech $i_0 = \min_{\prec} S$ teda najnižší bod z S . Partičnú sumu tohto modelu*

$$\mathcal{Z}_{HCR} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\substack{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N) \\ \text{kompatibilné}}} \prod_{i=1}^N w_{\Gamma_i} \quad (3.8)$$

prepíšeme do tvaru

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\substack{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N) \\ \text{kompatibilné na} \\ \text{úrovni } > i_0}} \prod_{i=1}^N w_{\Gamma_i} \prod_{a,b \in \{1, \dots, N\}} (1 + \mathfrak{C}(\Gamma_a, \Gamma_b, i_0)) \quad (3.9)$$

a roznásobíme zátvorky

$$\mathcal{Z}_{HCR} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N)} \prod_{i=1}^N w_{\Gamma_i} \sum_H \mathfrak{C}_H, \quad (3.10)$$

kde poslednú sumu berieme cez všetky možné prešitia H danej kolekcie $(\Gamma_1, \dots, \Gamma_n)$ a \mathfrak{C}_H je zodpovedajúci súčin stehových faktorov kompatibility cez všetky stehy. Týmto sme prepísali polymérový model na nový, ekvivalentný polymérový model, ktorého polyméry $\tilde{\Gamma}$ sú dvojice zložené z:

1. kolekcie polymérov $(\Gamma_1, \dots, \Gamma_M)$, $M \geq 1$.

2. súvislého prešitia reprezentovaného grafom \mathcal{G} . Ak $M = 1$, tak \mathcal{G} je prázdny graf.

Váhu každého nového polyméru $\tilde{\Gamma} = \{(\Gamma_1, \dots, \Gamma_M), \mathcal{G}\}$ definujeme ako

$$w_{\tilde{\Gamma}_a} = \frac{1}{M!} \prod_{i=1}^M w_{\Gamma_i} \mathfrak{C}_{\mathcal{G}}. \quad (3.11)$$

Partičná suma tohto nového polymérového modelu je ako obvykle definovaná vzťahom

$$\mathcal{Z}_{HCR}^{i_0} = \sum_{\tilde{N}=0}^{\infty} \frac{1}{\tilde{N}!} \sum_{\substack{(\tilde{\Gamma}_1, \dots, \tilde{\Gamma}_{\tilde{N}}) \\ \text{kompatibilné}}} \prod_{j=1}^{\tilde{N}} w_{\tilde{\Gamma}_j} \quad (3.12)$$

a výrazy (3.8) a (3.12) sú si rovné.

Dôkaz. Na začiatku sme iba prepísali partičnú sumu, pričom nulové príspevky kolekcii polymérov nekompatibilných na úrovni i_0 teraz vhodne pretransformujeme. Nekompatibilné kolekcie polymérov vytvoria príspevky, kde vystupujú faktory $0 = (1 - 1)$, ktorých súčiny vzájomne roznásobíme.

Sumáciu cez takto získané „ostehované“ kolekcie polymérov teraz preorganizujeme na sumáciu cez súvislé komponenty tejto kolekcie, pričom súvislosť je určená stehmi úrovne i_0 (stehy iných úrovní v tejto lemme neuvažujeme!). Označme tieto súvislé komponenty ako $\mathcal{K}_1, \dots, \mathcal{K}_{\tilde{N}}$, a nech tieto kolekcie majú počty starých polymérov $M_1, \dots, M_{\tilde{N}}$. Platí $\sum_{j=1}^{\tilde{N}} M_j = N$. Kolekciu \mathcal{K}_j si môžeme predstaviť ako graf na množine vrcholov $(1, \dots, M_j)$.

Takýto rozklad je možné na N prvkovej množine vykonať $\binom{N}{M_1, \dots, M_{\tilde{N}}} = \frac{N!}{M_1! M_2! \dots M_{\tilde{N}}!}$ spôsobmi.

Multinomický koeficient $\binom{N}{M_1, \dots, M_{\tilde{N}}}$ využijeme dvoma spôsobmi: člen $N!$ sa skrúti s členom $\frac{1}{N!}$ na začiatku partičnej sumy a členy typu $\frac{1}{M_i!}$ započítame do váh, ktoré priradíme súvislým komponentám (pripomeňme, že v nich sú staré polyméry prirodzene usporiadané pôvodným usporiadaním n -tice $(\Gamma_1, \dots, \Gamma_N)$).

Na túto situáciu sa môžeme pozeráť ako na nový polymérový model, ktorého polyméry sú súvislé podkolekcie usporiadanej množiny pôvodných polymérov so súvislým grafom reprezentujúcim prešitie príslušných polymérov. Tieto nové polyméry nanovo očísľujeme, čomu korešponduje voľba faktoru $\frac{1}{N!}$ v (3.12). \square

Táto lemma je základným indukčným krokom v konštrukcii, pomocou ktorej môžeme nakoniec rozviesť celú partičnú sumu. Tento krok teda opakujeme postupne pre ďalšie body i_1, \dots, i_K , kde $i_{a+1} = \text{succ } i_a$, $i_K = \max(\Lambda)$. Nakoniec teda dostávame model pozostávajúci iba zo vzájomne kompatibilných polymérov (dokonca sú kompatibilné sami so sebou), ktoré ale majú zložitú vnútornú štruktúru prešitého clusteru.

Túto štruktúru je možné ďalej konkretizovať a transformovať, viď. ďalšie časti tejto kapitoly.

3.2 Alternatívny pohľad na pojem prešitého clusteru

Prešitie sme sa rozhodli reprezentovať ako „graf“ s hranami typu $\{(\Gamma_a; i_0); (\Gamma_b; i_0)\}$. Túto štruktúru môžeme výrazne pretransformovať, a tým zjednodušiť, pomocou nasledujúcej lemy:

Lemma 2.

$$\sum_{c \in \mathcal{C}_n} (-1)^{|\mathcal{E}_c|} = (-1)^{n-1} (n-1)! \quad (3.13)$$

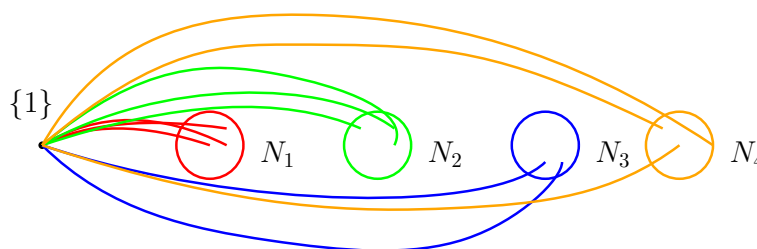
kde \mathcal{C}_n je množina všetkých súvislých grafov s vrcholmi $(1, \dots, n)$ a $|\mathcal{E}_c|$ je počet hrán grafu c .

Dôkaz. Tvrdenie plynie aj z exponenciálnej formule (Tvrdenie 3), ale pre názornosť uvedieme aj samostatný dôkaz tejto dôležitej vety.

Začnime tým, že v súvislom grafe c oddelíme hrany vychádzajúce zo zvoleného „veliteľa“, v našom prípade bodu $\{1\}$. Označme $N = (1, \dots, n)$. Náš graf sa potom rozpadne na súvislé komponenty N_i . Uvážme ďalej, že pri sumácii cez súvislé grafy budú odstránené hrany dávať príspevky typu $((1-1)^D - 1)$, kde D je počet hrán, po odstránení ktorých nenarušíme súvislosť daného grafu (s dohodou, že ak $D=0$, tak je aj daná zátvorka rovná 0). Potom platí

$$\sum_{c \in \mathcal{C}_n} (-1)^{|\mathcal{E}_c|} = S(n) = \sum_{\substack{N_i \\ \text{rozklady } N \setminus \{1\}}} \prod_i (-S(|N_i|)), \quad (3.14)$$

kde využívame indukčný predpoklad, teda platnosť (3.14) pre $m < n$. Znamienko $(-)$ pred $S(N_i)$ je v dôsledku sumácie spomenutých vynechaných príspevkov.



Obr. 3.2: Náčrt rozkladu na „veliteľa“ a súvislé komponenty, ktoré vzniknú odstránením hrán vychádzajúcich z bodu $\{1\}$

Ak označíme počet cyklov ako $C(n)$, máme

$$C(n) = (n-1)! = \sum_{\substack{N_i \\ \text{rozklady } N \setminus \{1\}}} \prod_i (C(|N_i|)). \quad (3.15)$$

Všimnime si, že faktor $(n-1)!$ na pravej strane (3.13) je počet cyklov na množine N , a zároveň počet permutácií množiny $N \setminus \{1\}$. Znamienko $(-)$ na pravej strane (3.14), spoločne so znamienkami $S(N_i)$ dajú univerzálne znamienko $(-1)^{n-1}$. Teda na pravej strane (3.14) dostávame so znamienkom $(-1)^{n-1}$ počet permutácií na $(n-1)$ bodovej množine.

□

Bude vhodné, aby sme zaviedli dva abstraktné pojmy – úchyt a spoločnosť:

Definícia 18 (Úchyt, spoločnosť). (Kruhový) úchytom \mathcal{U} rozumieme cyklickú grupu $(0, 1, \dots, P)$, kde $P \geq 0$.

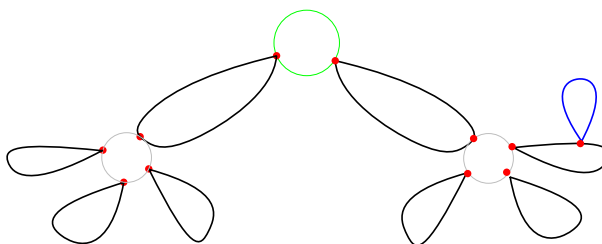
Nech A je nejaká neprázdna množina. (Kruhová) spoločnosť prvkov z A je kolekcia prvkov (a_0, \dots, a_P) , $a_i \in A$, pričom indexy tvoria úchyt. Kruhová spoločnosť sa nazve nerozložiteľná, ak sa nedá napísať ako viacnásobné opakovanie inej kruhovej spoločnosti. Ďalej sa budeme zaoberať iba nerozložiteľnými kruhovými spoločnosťami. Váhu nerozložiteľnej kruhovej spoločnosti definujeme ako

$$w_{\mathcal{U}_A} = \prod_{j=0}^{P-1} w_{a_j} \quad (3.16)$$

Pre naše účely zavedieme špeciálne druhy spoločnosti – snop, a jeho zovšeobecnenie – zväzok.

Definícia 19 (Snop). Snop \mathcal{S} definujeme ako spoločnosť polymérov. Zväzok \mathcal{B} definujeme rekurzívne ako spoločnosť zväzkov, pričom snop je najjednoduchší príklad netriviálneho zväzku.

Použitím lemy 2 môžeme prešité clustery pretransformovať na snopy, a následne iteráciou tejto konštrukcie (teda opakovaným použitím lém 1 a 2) dostaneme polymérový model rozvinutý do zväzkov, namiesto prešitých clusterov.



Obr. 3.3: Náčrt zväzku. Ak by sme odstránili modrý „prívesok“, a systémy naľavo a napravo by boli totožné, tak by sa jednalo o rozložiteľný zväzok. Čiernou sme označili polyméry, šedou snopy polymérov, zelená označuje zväzok a červenou sme označili kópie prešivacích bodov v polyméroch.

Poznámka. Zväzky sa dajú konštruovať aj priamo, bez použitia inktívnej lemy 1. Po prechode od clusterov k prešitým clusterom je možné začať prehliadať tieto prešité clustre a vyhľadávať medzi nimi tzv. „bezchybné“, pričom chybou rozumieme snop, kde nosiče jednotlivých polymérov nie sú disjunktné. Dá sa ukázať, že príspevky chybných clusterov sa vyrušia. V porovnaní s lemmou 1 by bola táto konštrukcia ťažkopádnejšia, a teda sme sa rozhodli ju z práce vynechať (bol to pôvodný spôsob, akým sme skúmali tieto objekty).

3.3 Využitie a interpretácia resumačnej metódy

V tomto odstavci načrtne niektoré použitia navrhnutej resumačnej metódy. Dôležitým, a pritom jednoduchým, príkladom je nasledujúce tvrdenie:

Tvrdenie 4 (Determinant matice Laplaciánu). *Nech E je $n \times n$ jednotková matica a W nech je $n \times n$ matica s prvkami ω_{ij} a s nulovou diagonálou splňujúca pre $\forall i \in \{1, \dots, n\}$ nerovnosť $\sum_j |\omega_{ij}| < 1$. Potom platí*

$$\det(E - W) = \sum_{\{C_m\}} \prod_i (-\omega_{C_m}) \quad (3.17)$$

$$= \prod_{\substack{P \\ \text{nerozložiteľné} \\ \text{uzavreté cesty}}} (1 - \omega_P) \quad (3.18)$$

$$= \exp \left(- \sum_{\substack{P_i \\ \text{nerozložiteľné} \\ \text{uzavreté} \\ \text{cesty}}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\omega_{P_i}^k}{k} \right) \quad (3.19)$$

Dôkaz. Popíšeme iba ideu horeuvedeného tvrdenia.

V tvrdení 4 sme najprv rozpísali definíciu determinantu, čím dostávame polymérový model, ktorého polyméry sú cykly C_m . Na tento polymérový model sme postupne aplikovali lemmu 1. Ostáva interpretovať štruktúru objektu, ktorý sme nazvali zväzok cyklov. Ukazuje sa, že takýto zväzok cyklov môžeme jednoznačne stotožniť s uzavretou cestou. Stotožnenie zväzku cyklov s cestou vykonáme pomocou nasledujúcej konštrukcie¹: Majme cestu P . Začneme s najvyšším viacnásobne navštíveným bodom. Roztrhneme cestu na podcesty odpovedajúce postupným návštevám dotyčného bodu. Podobnú konštrukciu zopakujeme pre všetky podcesty. Po konečnom počte takýchto krokov dospejeme ku kolekcií cyklov, ktorých viazanie do zväzkov je presne dané predchádzajúcim roztrhaním.

Týmto sme dostali, že uzavreté cesty (ktoré sa všeobecne môžu mnohonásobne pretínať aj mimo počiatočného/koncového bodu) sa dajú vyjadriť ako zväzky cyklov, pričom cyklus navštívi každý bod práve jedenkrát. \square

Poznámka. Toto tvrdenie z lineárnej algebry sa dá dokázať aj bez odvolania sa k polymérovému modelu, viď. [VZ02], príklad 11.9.

Na základe tohto si dovoľíme predpokladať, že táto naša metóda môže byť užitočná na lepšie pochopenie exaktne riešiteľných modelov, hlavne na pochopenie Onsagerovho riešenia 2D Isingovho modelu, prípadne iných polymérových modelov, kde množina všetkých možných polymérov je práve množinou všetkých „cyklov“ a ich váhy sú dané súčinom zodpovedajúcich maticových elementov.

Na záver ešte uveďme analógiu známych kritérií (Kotecký-Preiss) pre náš model. Narozdiel od abstraktných situácií študovaných v uvedených odkazoch sa v našom prípade tieto tvrdenia redukujú na elementárne odhady. Uvádzame ich bez dôkazu.

¹ktorá je organizovaná v opačnom smere než konštrukcia zväzkov

Tvrdenie 5 (Kotecký-Preiss pre zväzky). Označme ako $\text{top}(\mathcal{Q})$ najvyšší bod prešitého clusteru \mathcal{Q} voči usporiadaniu \prec . Ďalej zavedme

$$h_i = \sum_{\{\mathcal{Q}: i=\text{top}(\mathcal{Q})\}} w_{\mathcal{Q}} \quad (3.20)$$

$$a_i = \sum_{\{\mathcal{Q}: i=\text{top}(\mathcal{Q})\}} |w_{\mathcal{Q}}| \quad (3.21)$$

Potom platí

$$\sum_{\substack{\text{top}(\mathcal{Q})=i \\ \text{nerozložiteľné}}} |w_{\mathcal{Q}}| \leq \sum_{\{\mathcal{Q}: \text{top}(\mathcal{Q})=i\}} |w_{\mathcal{Q}}| \prod_{j \in \text{supp}(\mathcal{Q})} \left(\frac{1}{1-a_j} \right) \quad (3.22)$$

Ďalej, ak platí

$$\sum_{\{\mathcal{Q} | \text{top}(\Gamma)=i\}} |w_{\mathcal{Q}}| \left(\frac{1}{1-a} \right)^{\text{supp}(\mathcal{Q})} < a \quad (3.23)$$

potom platí

$$|h_i| \leq a. \quad (3.24)$$

Poznámka. Pre takéto a potom platí:

$$a \geq \sup(a_i) \quad (3.25)$$

Pri vyjadrovaní výrazu $\log \mathcal{Z}$ je nutné uvážiť, že okrem príspevkov nerozložiteľných zväzkov sú tu aj zväzky rozložiteľné, ktoré sú mocninou (niekoľkonásobným opakovaním) zväzku nerozložiteľných. Príslušné vyjadrenia $\log \mathcal{Z}$ vynechávame.

Zdôrazňujeme, že v termodynamickej limite a pri použití lexikografického usporiadania sú veličiny h_i a a_i z predchádzajúceho tvrdenia translačne invariantné.

Záver

V práci sme sa zaoberali clusterovými rozvojmí v klasickej, nekvantovej, rovnovážnej štatistickej fyzike. Špeciálne nás zaujímali tvrdo odpudivé polymérové modely. Po krátkom predstavení potrebného matematického aparátu a samotnej techniky sme sa zaoberali resumačnou metódou pre partičnú funkciu HCR polymérového modelu.

V práci na predstavenej resumačnej metóde plánujeme pokračovať. Do budúcnosti by bolo možné:

- pokúsiť sa ešte viac zjednodušiť metódu reprezentovanú lemmou 1.
- pomocou predstavenej metódy zprehľadniť Onsagerovo riešenie 2D Isingovho modelu, prípadne iné exaktne riešiteľné modely štatistickej fyziky. Onsagerovo riešenie má 3 dôležité kroky. V prvom prepíšeme Isingov model ako model, kde množina polymérov splýva s množinou cyklov na duálnej mriežke (s rafinovanou voľbou maticových elementov pomocou faktoru \sqrt{i}). Druhým krokom je naša konštrukcia a tretím je analytická úvaha – vyjadrenie stopy (teda sumy cez všetky cesty) ako sumy cez vlastné čísla určitého translačne invariantného operátora pomocou diskkrétnej Fourierovej transformácie. V termodynamicknej limite prechádza príslušná suma v integrálne vyjadrenie voľnej energie.
- preskúmať použiteľnosť tejto metódy na rozvoje okolo gaussovských mier. Tento problém je relatívne dobre preskúmaný pre gaussovské miery s pozitívne definitnou maticou. Pre pozitívne semi-definitnú maticu (na ktorú vedú mnohé dôležité modely, napr. rotátor) dostávame ťažko kontrolovateľné neabsolútne konvergentné rady.
- skúsiť na základe tejto metódy nejaké vhodné numerické experimenty ilustrujúce uvedené teoretické konštrukcie, špeciálne reprezentáciu ciest ako zväzkov cyklov.

Zoznam použitej literatúry

- [Bry84] D. C. Brydges. A short course on cluster expansions. In *Summer School in Theoretical Physics, Session XLIII: Critical Phenomena, Random Systems, Gauge Theories. Les Houches, France, August 1-September 7, 1984*, strany 129–183, 1984.
- [Cam82] C. Cammarota. Decay of correlations for infinite range interactions in unbounded spin systems. *Comm. Math. Phys.*, 85(4):517–528, 1982.
- [Dob96] R. L. Dobrushin. Estimates of semi-invariants for the Ising model at low temperatures. *Translations of the American Mathematical Society-Series 2*, 177:59–82, 1996.
- [D.R63] D. Ruelle. Correlation functions of classical gases. *Annals of Physics*, 25(1):109 – 120, 1963.
- [Far10] W. G. Faris. Combinatorics and cluster expansions. *Probability Surveys*, 7:157–206, 2010.
- [FP07] R. Fernández a A. Procacci. Cluster expansion for abstract polymer models. New bounds from an old approach. *Communications in Mathematical Physics*, 274(1):123–140, 2007.
- [GJ87] J. Glimm a A. Jaffe. *Quantum Physics: A Functional Integral Point of View*. Springer, 2 edition, 1987. ISBN : 9780387964768.
- [Kot06] R. Kotecký. Cluster expansion. *Encyclopedia of Mathematical Physics*, 1:531–536, 2006.
- [KP86] R. Kotecký a D. Preiss. Cluster expansion for abstract polymer models. *Comm. Math. Phys.*, 103(3):491–498, 1986.
- [LP64] J. L. Lebowitz a O. Penrose. Convergence of virial expansions. *Journal of Mathematical Physics*, 5(7):841–847, 1964.
- [MM41] J. E. Mayer a E. Montroll. Molecular distribution. *The Journal of Chemical Physics*, 9(1):2–16, 1941.
- [MN09] J. Matoušek a J. Nešetřil. *Kapitoly z diskretní matematiky*. Karolinum, 2009. ISBN: 978-80-2466-1740-4.
- [OEoIS] The Online Encyclopedia of Integer Sequences. seq. A001187; editor N. J. A. Sloane. <http://oeis.org/A001187>. prevzaté dňa 19.6.2016.

- [PY15] A. Procacci a S. A. Yuhjtman. Convergence of Mayer and Virial expansions and the Penrose tree-graph identity. *ArXiv e-prints*, August 2015.
- [Sok99] A. D. Sokal. Bounds on the Complex Zeros of (Di)Chromatic Polynomials and Potts-Model Partition Functions. *eprint arXiv:cond-mat/9904146*, April 1999.
- [Sta97] R. P. Stanley. *Enumerative Combinatorics. Vol. 1, vol. 49 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [Uel] D. Ueltschi. Cluster expansions. prebraté z <http://www.ueltschi.org/teaching/chapclexp.pdf>, dňa 24.11.2016.
- [VZ02] K. Výborný a M. Zahradník. *Používáme lineární algebru: sbírka řešených příkladů*. Učební texty Univerzity Karlovy v Praze. Karolinum, Praha, 2002. ISBN 80-246-0633-X.
- [Wil13] H. S. Wilf. *generatingfunctionology*. Elsevier, 2013.

Zoznam použitých skratiek

$\{a_1, \dots, a_n\}$	neusporiadaná n -tica
(a_1, \dots, a_n)	usporiadaná n -tica
$\pi(A)$	permutácia množiny A
$\Pi_a(A)$	množina všetkých permutácií množiny A s pevným bodom $a \in A$
$g = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$	graf g s množinou vrcholov \mathcal{V} a množinou hrán \mathcal{E}
\mathcal{G}_n	množina všetkých grafov s množinou vrcholov isomorfnou s $(1, \dots, n)$
\mathcal{C}_n	množina všetkých súvislých grafov s množinou vrcholov isomorfnou s $(1, \dots, n)$
\mathcal{T}_n	množina všetkých stromov s množinou vrcholov isomorfnou s $(1, \dots, n)$
K_n	úplný graf na n vrchoch
\mathcal{Z}	partičná suma
\vec{r}, \vec{p}	poloha, hybnosť
p, V, β, λ	tlak, objem, inverzná teplota, aktivita
Γ_i	polymér (viď. polymérový model)
$w_{\Gamma_i}, \omega_{\Gamma_i}, \text{supp}(\Gamma_i)$	váha polyméru Γ_i , záporná váha polyméru Γ_i , nosič polyméru Γ_i
$\mathbf{c}_{\Gamma_i, \Gamma_j}; \mathbf{c}_g$	faktor kompatibility medzi polymérmi Γ_i, Γ_j ; resp. faktor kompatibility pre graf g .
$\text{Ind}(i)$	úroveň bodu i
\prec	pomocné usporiadanie mriežky $\Lambda \in \mathbb{Z}^n$
$\text{succ}(i)$ \prec	prvok danej množiny usporiadanej usporiadaním \prec , nasledujúci po prvku i .
HCR model	tvrdodopudivý polymérový model
$\mathcal{S}, \mathcal{C}, \mathcal{Q}, \mathcal{B}$	snop, cluster, prešíty cluster, zväzok