

Математическое моделирование

Парамакросистемы с упорядоченным заполнением состояний. Часть II: Трехмерные системы

Д. Л. ДОРОФЕЕВ, С. В. ЕЛФИМОВ, А. Е. ПОПОВА

Аннотация. Продолжена разработка подхода к статистическому анализу макросистем с упорядочиванием. Рассмотрены трехмерные системы, обозначенные как IDA2, характеризуемые более сложным упорядочением по сравнению с ранее рассмотренными IDA-системами. Моделью IDA2-системы является двумерный массив из различных ячеек, заполняемых шарами, которые считаются неразличимыми. Заполнение ячеек происходит упорядоченным образом. Микросостояние системы задается перечислением заселенностей всех ячеек. Каждому микросостоянию ставится в соответствие трехмерная диаграмма Юнга, изображающая плоское разбиение числа элементов системы. В пространстве микросостояний вводится метрика. Макросостояние с центром в данной диаграмме определяется как ее единичная окрестность. Для обозначения расположения клеток в диаграмме вводится понятие оболочки. Макросостояния, включающие в себя наибольшее количество микросостояний для данного количества элементов, называются равновесными. Получены выражения для величины единичной окрестности микросостояния, вероятности и энтропии макросостояния, исследованы равновесные состояния. Для исследованных количеств клеток диаграммы, состоящие из конечного числа заполненных оболочек, соответствуют равновесным состояниям. Данная модель может быть использована для исследования роста кластерных ассоциаций однородных элементов.

Ключевые слова: макросистемы, плоские разбиения, трехмерные диаграммы Юнга.

Введение

В настоящей работе мы продолжаем разработку подхода к статистическому анализу макросистем с упорядочиванием [8–10] и рассматриваем системы, характеризуемые более сложным упорядочением. А именно, в данной работе рассматриваются системы, микросостояния которых могут быть представлены плоскими разбиениями [3–5] или эквивалентными им трехмерными диаграммами Юнга [6, 7]. Подобные системы могут быть использованы для моделирования процессов роста кристаллов и подобных им упорядоченных ассоциаций однопипных

элементов в различных задачах математического моделирования макросистем.

Представим себе трехмерный ящик бесконечной протяженности, ограниченный двумя бесконечно высокими стенками, образующими угол. Ящик поделен на ячейки, каждая бесконечной емкости. В этот ящик случайным образом попадают неразличимые элементы («шары») (см. рис. 3). Поставим условие: пусть элемент остается в ящике только в том случае, если у него имеется не менее трех соседей (соседями могут быть другие элементы в той же или соседних ячейках, а также дно или стенка ящика). Это означает, что в получившейся конфи-

густоты заселенности ячеек будут следовать в невозрастающем порядке, если считать от угла. Такую конфигурацию, имеющую вид трехмерной диаграммы Юнга (см. рис. 1), мы рассматриваем как *микросостояние* системы.

Такие конфигурации могут быть эквивалентным образом представлены посредством плоских разбиений. Плоское разбиение числа n — это двумерная таблица из неотрицательных целых чисел $\lambda_{ij}, i > 0, j > 0,$

$$\begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} & \dots & \lambda_{1q} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} & \dots & \lambda_{2q} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda_{k1} & \lambda_{k2} & \lambda_{k2} & \dots & \lambda_{kq} \end{pmatrix},$$

удовлетворяющих условию невозрастания по строкам и столбцам [3]: $\lambda_{ij} \geq \lambda_{i+1,j}, \lambda_{ij} \geq \lambda_{i,j+1}.$

В нашем случае пары индексов (i, j) нумеруют ячейки ящика, а числа λ_{ij} представляют собой заселенности этих ячеек. На рис. 1 показана трехмерная диаграмма Юнга для плоского разбиения

$$\pi = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Далее мы вводим метрику в множестве микросостояний IDA2-системы, понятия окрестности и *макросостояния* для подобных систем и анализируем их статистические свойства.

1. Статистика системы типа IDA2

Итак, пусть система состоит из одного ящика с ячейками, которые заполняются элементами (шарами), как описано выше. Набор заселенностей ячеек λ_{ij} , определяющий микросостояние системы, соответствует плоскому разбиению λ . То есть каждое микросостояние системы данного типа задается некоторым плоским разбиением.

Далее будем следовать подходу, предложенному в [10], с использованием тех же обозначений, перенося его со случая обычных разбиений на плоские.

Зафиксируем количество элементов (шаров) в системе n и обозначим Γ_n множество всех микросостояний такой системы, т. е. множество плоских разбиений числа n , а $N(\Gamma_n)$ — количество таких

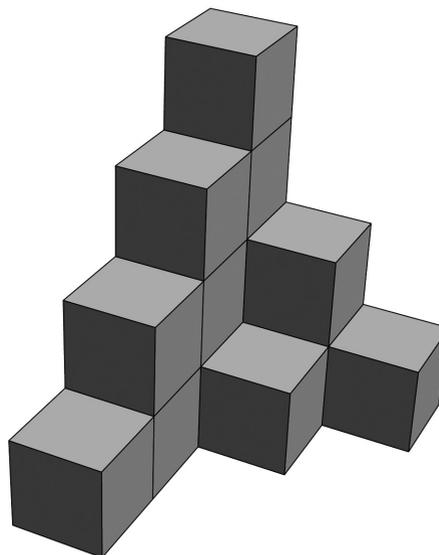


Рис. 1. Пример трехмерной диаграммы Юнга

разбиений. Вероятности всех микросостояний будем считать одинаковыми и равными $1/N(\Gamma_n).$

В пространстве микросостояний нашей системы зададим следующую метрику: назовем расстоянием $\rho(\lambda, \lambda')$ между двумя диаграммами λ и λ' наименьшее число элементов, которые нужно переставить, чтобы получить из одной диаграммы другую. Определенное таким образом расстояние вычисляется по формуле:

$$\rho(\lambda, \lambda') = \frac{1}{2} \sum_{ij} |\lambda_{ij} - \lambda'_{ij}|.$$

Назовем единичной окрестностью $Q(\lambda)$ диаграммы λ множество диаграмм, лежащих от λ на расстоянии, меньшем либо равном единице:

$$Q(\lambda) = \{\lambda' \mid \rho(\lambda, \lambda') \leq 1\}.$$

Такие окрестности будем рассматривать как *макросостояния* системы. $N(Q(\lambda))$ — количество диаграмм в окрестности, иначе говоря, емкость окрестности, представляет собой количество микросостояний, относящихся к одному макросостоянию. Соответственно, вероятность макросостояния будем определять как

$$P(Q(\lambda)) = \frac{N(Q(\lambda))}{N(\Gamma_n)}.$$

Энтропия состояния, вычисляемая как логарифм вероятности, следовательно, имеет вид:

$$S(Q(\lambda)) = \ln P(Q(\lambda)) = \ln N(Q(\lambda)) - \ln N(\Gamma_n).$$

Емкость единичной окрестности некоторой диаграммы может быть найдена, в соответствии с определением, путем перебора всех диаграмм и подсчета количества соседних к данной диаграмме, но такой

способ является весьма ресурсоемким с вычислительной точки зрения, даже при относительно небольших n . Однако емкость может быть найдена значительно более эффективным методом, без непосредственного перебора, путем анализа формы заданной диаграммы (см. Приложение А).

На рисунке 2 представлены величины единичных окрестностей для разбиений числа $n = 14$. Разбиения упорядочены по убыванию величины окрестности (по оси абсцисс отложены условные номера разбиений). В случае $n = 14$ наибольший размер окрестности имеют три разбиения:

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_3 = \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

симметричные друг другу. Соответствующие им макросостояния: $Q(\lambda_1)$, $Q(\lambda_2)$ и $Q(\lambda_3)$, таким образом, оказываются наиболее вероятными. Следуя принятой в статистической физике терминологии, такие макросостояния (имеющие наибольшую вероятность) будем называть *равновесными* [1, 2].

2. Равновесные состояния системы IDA2

Поставим себе задачу рассмотреть равновесные состояния системы для различных значений n . Для удобства их описания, как и в предыдущей работе [10], введем понятие *оболочки*. А именно, первой оболочкой, которую будем обозначать a , назовем угловую клетку (см. рис. 4), второй оболочкой b назовем три соседние с ней клетки, соответственно, третья оболочка c состоит из клеток, соседних со второй оболочкой, и т. д. Например, запись $a1b2c1$ будет обозначать диаграмму с одним элементом на оболочке a , двумя — на оболочке b и одним — на оболочке c . Таким образом, диаграммы, показанные на рис. 4 записываются как $a1$, $a1b3$, $a1b3c6$ и $a1b3c6d10$. Следует заметить, что одна и та же оболочечная запись может соответствовать нескольким

диаграммам, в частности, переходящим друг в друга при повороте или отражении. Так три верхние диаграммы на рис. 3 переходят друг в друга при поворотах $(x, y, z) \mapsto (z, x, y) \mapsto (y, z, x)$, а две нижние диаграммы переходят друг в друга при отражении $(x, y, z) \mapsto (y, x, z)$. Следует учитывать, что одному заданному значению n могут соответствовать несколько различных равновесных состояний, т. е. несколько макросостояний с наибольшей вероятностью. В Приложении В приведены равновесные состояния для n от 1 до 21 в оболочечных обозначениях, а на рис. 5 — некоторые из них в виде трехмерных диаграмм Юнга. Как можно видеть, до $n = 15$ включительно заполнение оболочек происходит последовательно, но при $n = 16$ эта последовательность нарушается — очередной элемент укладывается не на неполную оболочку d , а на следующую оболочку f . Этот эффект (переход на новую оболочку при незаполненной предыдущей) можно наблюдать также при $n = 18$ и т. д.

Заключение

Рассмотрен тип парамакросистем, для статистических характеристик которого важную роль играет механизм заполнения состояний. Получены выражения для вероятностей макросостояний IDA2-системы по аналогии с IDA-системой. Предъявлена аналитическая формула для емкости единичной окрестности. Исследованы равновесные состояния системы. Рассмотренная модель отражает важные свойства механизма роста кластеров ассоциаций однородных элементов: оболочечный механизм процесса и определяющую роль числа ближайших соседей у частицы.

Приложение А. Расчет емкости единичной окрестности диаграммы

Будем говорить, что в ячейке (i, j) есть выступ, если ее заселенность больше, чем заселенность ячеек $(i + 1, j)$ и $(i, j + 1)$. Для краткости обозначим $x = (i, j)$. Введем множество выступов диаграммы λ :

$$M_\lambda = \{ x \mid (\lambda_{i,j} > \lambda_{i+1,j}) \wedge (\lambda_{i,j} > \lambda_{i,j+1}) \}.$$

и количество выступов (размер множества M_λ): $m_\lambda = N(M_\lambda)$.

Аналогично, будем говорить, что в ячейке $x = (i, j)$ есть впадина, если ее заселенность меньше, чем заселенность ячеек $(i - 1, j)$ и $(i, j - 1)$. Введем множество впадин диаграммы λ :

$$K_\lambda = \{ x \mid (\lambda_{i,j} < \lambda_{i-1,j}) \wedge (\lambda_{i,j} < \lambda_{i,j-1}) \},$$

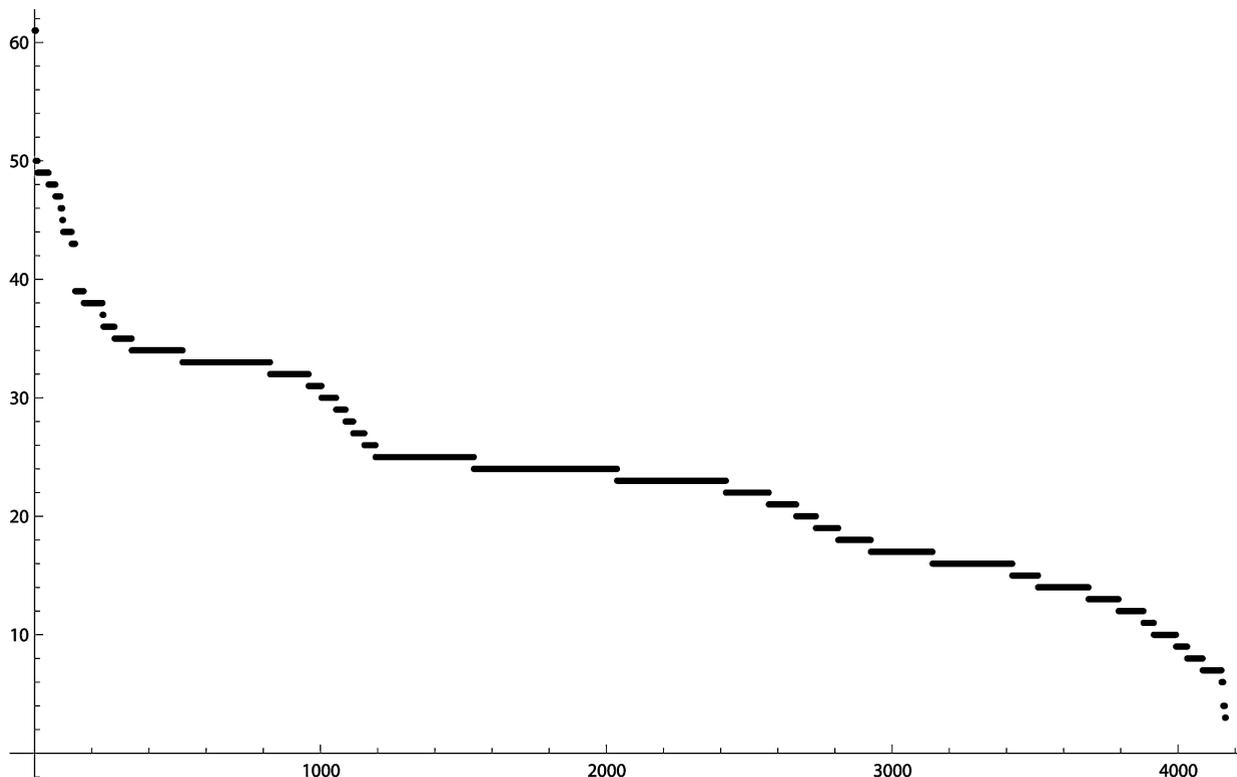


Рис. 2. Емкости единичных окрестностей для разбиений числа $n = 14$

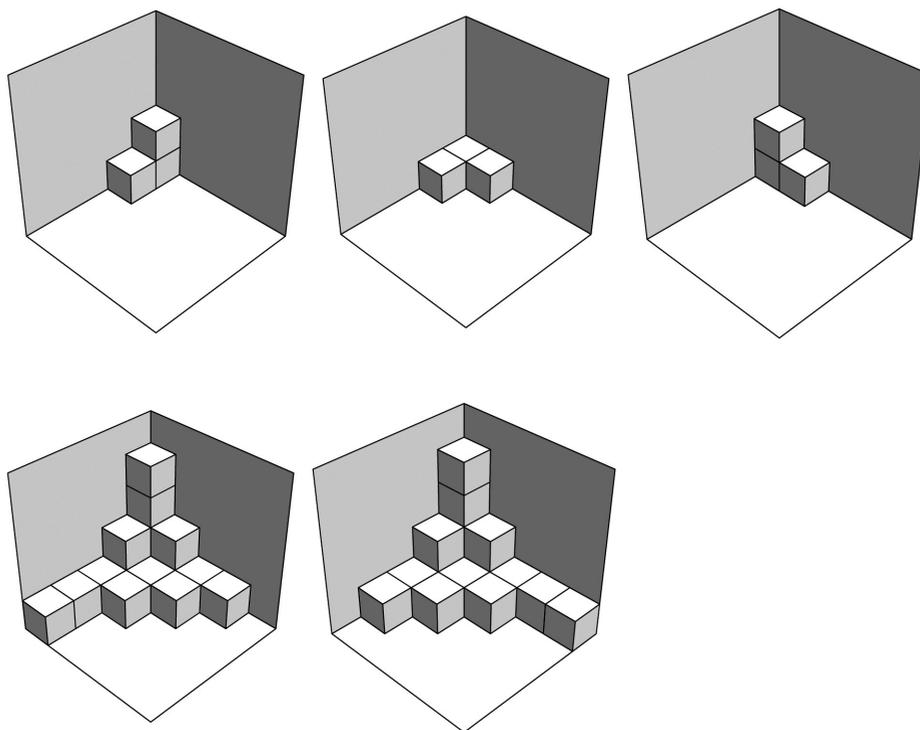


Рис. 3. Верхние три диаграммы соответствуют поворотной симметрии, нижние две диаграммы соответствуют зеркальной симметрии

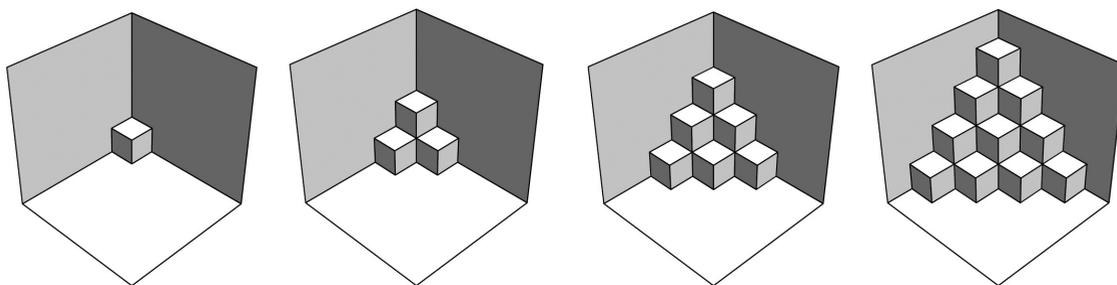


Рис. 4. Диаграммы Юнга, соответствующие полностью заполненным оболочкам a , b , c и d .

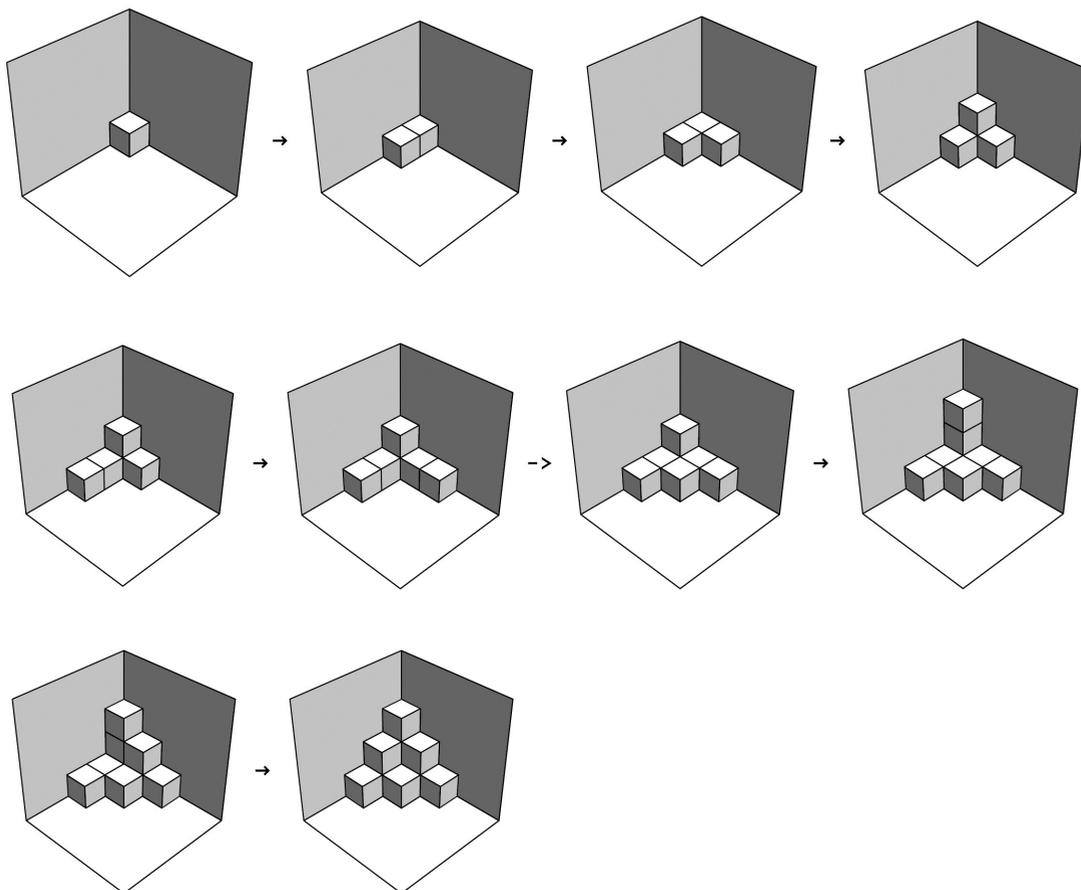


Рис. 5. Некоторые равновесные состояния для n от 1 до 10

и количество впадин (размер множества K_λ): $k_\lambda = N(K_\lambda)$.

Для каждого выступа $x \in M_\lambda$ введем вспомогательную функцию $p_\lambda(x)$ — число впадин в диаграмме, в которые не может быть переставлена вершинная клетка выступа x :

$$p_\lambda(x) = 1_{\alpha(\lambda)}(x) + 1_{\beta(\lambda)}(x) + 1_{\gamma(\lambda)}(x),$$

где

$$1_X(x) = \begin{cases} 1, & x \in X, \\ 0, & x \notin X, \end{cases}$$

а множества $\alpha(\lambda)$, $\beta(\lambda)$ и $\gamma(\lambda)$ определяются следующим образом:

$$\alpha(\lambda) = \{ x \mid ((i = 1) \vee (\lambda_{i,j} > \lambda_{i+1,j})) \wedge ((j = 1) \vee (\lambda_{i,j} > \lambda_{i,j+1})) \},$$

$$\beta(\lambda) = \{ x \mid (\lambda_{i,j+1} = \lambda_{i,j} - 1) \wedge ((i = 1) \vee (\lambda_{i-1,j+1} > \lambda_{i,j} - 1)) \},$$

$$\gamma(\lambda) = \{ x \mid (\lambda_{i+1,j} = \lambda_{i,j} - 1) \wedge ((j = 1) \vee (\lambda_{i+1,j-1} > \lambda_{i,j} - 1)) \}.$$

Введем также сумму значений $p_\lambda(x)$ по всем выступлениям диаграммы:

$$p_\lambda = \sum_{x \in M_\lambda} p_\lambda(x).$$

Рассмотрение возможных перестановок элементов приводит к следующему выражению для емкости единичной окрестности:

$$N(Q(\lambda)) = k_\lambda m_\lambda - p_\lambda + 1.$$

Приложение В. Равновесные состояния для $1 \leq n \leq 21$

Таблица 1

Равновесные состояния для $1 \leq n \leq 21$.

n=1	a1 (1 разбиение) — заполненная оболочка
n=2	a1b1 (3 разбиения)
n=3	a1b2 (3 разбиения)
n=4	b3 (1 разбиение) — заполненная оболочка
n=5	b3c1 (3 разбиения)
n=6	b3c2 (3 разбиения)
n=7	b3c3 (3 разбиения)
n=8	b3c4 (3 разбиения)
n=9	b3c5 (3 разбиения)
n=10	c6 (1 разбиение) — заполненная оболочка
n=11	c6d1 (3 разбиения)
n=12	c6d2 (3 разбиения)
n=13	c6d3 (1 разбиение)
n=14	c6d4 (3 разбиения)
n=15	c6d5 (3 разбиения)
n=16	c6d5f1 (12 разбиений) c6d6 (12 разбиений)
n=17	c6d7 (3 разбиения)
n=18	c6d7f1 (3 разбиения)
n=19	c6d9 (1 разбиение)
n=20	d10 (1 разбиение) — заполненная оболочка
n=21	d10f1 (3 разбиения)

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Часть 1. / Теоретическая физика. Т. V. М.: Наука, 1976.
2. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния / Теоретическая физика. Т. IX. М.: Наука, 1978.
3. Эндрюс Г. Теория разбиений. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982.
4. Макдональд И. Симметрические функции и многочлены Холла. М.: Мир, 1984.
5. Stanley R. P. Ordered structures and partitions. Memoirs of the Amer. Math. Soc., **119**. 1972.
6. Okounkov A., Reshetikhin N. Correlation function of Schur Process with application to local geometry of a random 3-Dimensional young diagram. J. Amer. Math. Soc. **16**. 2003. p.581-603.
7. Toshio N., Kanehisa T. Integrable structure of melting crystal model with external potentials. <http://arxiv.org/abs/0807.4970v3>
8. Дорофеев Д. Л., Зон Б. А., Попков Ю. С. // Автоматика и телемеханика. № 2. С. 52-63. 2005.
9. Дорофеев Д. Л., Зон Б. А., Попков Ю. С. // Автоматика и телемеханика. № 10. С. 19-30. 2008.
10. Дорофеев Д. Л., Попова А. Е., Попков Ю. С. Парамикросистемы с упорядоченным заполнением состояний. Часть I // Труды ИСА РАН, 2013. Т. 64. Вып. 4. С. 17-25.

Дорофеев Дмитрий Львович. Доцент Воронежского ГУ. К.ф.-м. н. Окончил Воронежский ГУ в 1991 г. Количество печатных работ: 34. Область научных интересов: статистическая физика, квантовая механика, теория макросистем. E-mail: dmitrii.dorofeev@gmail.com

Елфимов Сергей Викторович. Ассистент кафедры математической физики Воронежского ГУ. Магистр физики. Окончил Воронежский ГУ в 2011 г. Количество печатных работ: 2. Область научных интересов: статистическая физика, квантовая механика, теория макросистем. E-mail: ElfimovSerg@gmail.com

Попова Александра Евгеньевна. Окончила Воронежский ГУ в 2010 г. Магистр физики. Область научных интересов: статистическая физика, теория макросистем, математическое моделирование. E-mail: SashaPopova7891@gmail.com