

**TEKST NR 382**

**2000**

**Den selvundvigende vandring**

**Et matematik professionsprojekt**

Martin Niss  
Arnold Skimminge

**TEKSTER fra**

**IMFUFA**

**ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER**  
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES  
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA · Roskilde Universitetscenter · Postboks 260 · DK-4000 Roskilde  
Martin Niss & Arnold Skimminge: Den selvundvigende vandring. Et matematik  
professionsprojekt.

IMFUFA tekst nr. 382/2000

78 sider

ISSN 0106-6242

---

Denne rapport omhandler den selvundvigende vandring, som bevæger sig mellem de nærmeste naboer i et gitter. Et af de vigtigste problemer i forbindelse med den selvundvigende vandring er at bestemme værdien af den karakteristiske parameter, forbindelseskonstanten  $\mu$ . Dette problem er endnu ikke løst på en matematisk stringent måde. Vi beskriver to indfaldsvinkler til at løse problemet, en matematisk og en fysisk. Den matematiske metode opstiller to uligheder for  $\mu$ . Den fysiske metode benytter statistisk mekanik til at fremkomme med et resultat der formodentligt er korrekt. Vi når frem til at den fysiske argumentation ikke er stringent, idet der anvendes en matematisk sætning udenfor dens gyldighedsområde.

Den selvundvigende vandring  
Et matematik professionsprojekt

Martin Niss

Arnold Skimminge

# Forord

Dette er et projekt på matematik-overbygningen på RUC, og er et 3. modul projekt af forskningsvarianten under professionsbindingen. Det blev udarbejdet over to semestre i kalenderåret 1999.

Projektets idé udsprang af, at vi faldt over et uløst matematisk problem, da vi læste om stokastiske processer. Dette problem er *den selvundvigende vandring*, hvis centrale problemstillinger er motiveret af polymerkemi. Efter forgæves forsøg på at løse problemet, besluttede vi os for at undersøge en eksakt, men ikke stringent, metode, som fysikerne benytter til at løse problemet. Denne undersøgelse har resulteret i foreliggende rapport.

Vi har forudsat at læseren er bekendt med grundlæggende lineær algebra, matematisk analyse og sandsynlighedsregning, svarende til indledende matematikkurser på et universitet. Derimod har vi ikke forudsat noget bekendtskab med fysik.

En stor tak til Viggo Andreassen som har været vejleder af gavn, men ikke af navn i andet semester. Ligeledes tak til John Villumsen for vejledning i det første semester.

Martin Niss og Arnold Skimminge  
IMFUFA, Roskilde Universitetscenter  
Januar 2000

## Forord til IMFUFA tekst

Foreliggende imfufa-tekst er identisk med den rapport som blev afleveret til eksamenskontoret, bortset fra rettelser af enkelte skønhedsfejl.

Martin Niss og Arnold Skimminge  
IMFUFA, Roskilde Universitetscenter  
Marts 2000

# Indhold

<b>1</b>	<b>Indledning</b>	<b>1</b>
1.1	Projektets problem . . . . .	3
1.2	Er den selvundvigende vandring interessant? . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Grundlæggende begreber</b>	<b>5</b>
2.1	Gitre . . . . .	5
2.1.1	Diagrammer på gitre . . . . .	6
2.1.2	Vandringer på gitre . . . . .	7
2.2	Den selvundvigende vandring . . . . .	7
2.2.1	Sammenkædning af selvundvigende vandringer . . . . .	7
2.2.2	Forbindelseskonstanten . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Forbindelseskonstantens nedre og øvre grænser</b>	<b>11</b>
3.1	Primitive metoder . . . . .	11
3.2	Fisher og Sykes' metode . . . . .	12
3.2.1	Frembringende funktioner . . . . .	14
3.3	Alms metode . . . . .	15
3.3.1	Princippet i metoden . . . . .	16
3.3.2	Metoden i praksis . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Statistisk mekanik</b>	<b>21</b>
4.1	De grundlæggende principper i statistisk mekanik . . . . .	21
4.1.1	Kritiske fænomener . . . . .	23
4.1.2	Spin-modeller . . . . .	25
4.2	De anvendte statistisk mekaniske modeller . . . . .	29
4.2.1	Nienhuis' løkkemodel . . . . .	30
4.2.2	SOS-model . . . . .	32
4.2.3	6V-model . . . . .	32
4.2.4	Potts-model . . . . .	34
<b>5</b>	<b>Nienhuis' værdi for forbindelseskonstanten</b>	<b>37</b>
5.1	Løkkemodellen og den selvundvigende vandring . . . . .	37
5.1.1	Bestemmelse af det kritiske punkt . . . . .	39
5.2	SOS-model på bikubegitteret . . . . .	39
5.3	6V-model på kagomé-gitteret . . . . .	42
5.4	Potts-model på trekantsgitteret . . . . .	44

---

5.4.1	Transformation til 6V-model på kagomégitteret . . . .	46
5.5	Opsamling . . . . .	53
<b>6</b>	<b>Diskussion</b>	<b>57</b>
6.1	Den matematiske tilgang . . . . .	57
6.2	Den fysiske tilgang . . . . .	58
6.3	Hvilke dele af den fysiske metode er stringente? . . . . .	59
6.3.1	Statistisk mekanik . . . . .	59
6.3.2	Koblingen mellem forbindelseskonstanten og løkkemodellens kritiske punkt . . . . .	60
6.3.3	De statistisk mekaniske modeller – og transformationerne mellem dem . . . . .	60
6.3.4	Renormalisering . . . . .	61
6.4	Grænsen $n \rightarrow 0$ . . . . .	61
6.4.1	Hvor bruges grænsen $n \rightarrow 0$ ? . . . . .	61
6.4.2	De forskellige opfattelser af $n \rightarrow 0$ . . . . .	62
6.4.3	Madras og Slades metode . . . . .	64
6.4.4	Historiske paralleller . . . . .	65
6.5	Konklusion . . . . .	66
	<b>Litteratur</b>	<b>69</b>

# 1 Indledning

*Forestil dig, at du står i et kryds i en stor by, hvis gader ligger som et kvadratisk net. Du vælger en tilfældig gade, og går hen til næste kryds. Ved hvert kryds kan du vælge mellem at fortsætte lige ud eller gå til højre eller venstre. Der er kun én regel: Du må ikke vende tilbage til et kryds, du allerede har været i.*  
[Madras & Slade, 1993, frit oversat]

Ovenstående definerer på helt almindelig dansk det matematiske problem, som dette projekt omhandler. Vi har valgt at kalde problemet for *den selvundvigende vandring*, der kommer af det engelske udtryk 'The Self-avoiding Walk'.<sup>1</sup> Den selvundvigende vandring er ikke kun defineret for det kvadratiske gitter, men kan defineres for ethvert gitter, f.eks. bikubegitteret, kagomégitteret eller et flerdimensionalt gitter.

Den selvundvigende vandring minder umiddelbart kraftigt om den sædvanlige random walk, som der eksisterer en stor mængde resultater for. En random walk er en markov-kæde<sup>2</sup>, mens den selvundvigende vandring ikke har denne egenskab, og det er langt fra klart om, den kan opfattes som en proces. Dette gør, at man kun i ringe omfang kan overføre analysen af en random walk til den selvundvigende vandring. Der er i det hele taget meget få resultater om den selvundvigende vandring.

Den selvundvigende vandring er et forholdsvist nyt matematisk forskningsfelt, der stammer fra kemiens verden, hvor den i 50'erne opstod som en matematisk model for lineære polymere. En lineær polymer består af molekyler, som er lange kæder af enheder, og hvert molekyle indeholder op til flere 100 000 sådanne enheder. Kemikere og fysikere, som beskæftiger sig med polymere, har ofte behov for at vide, hvor mange forskellige konfigurationer et polymermolekyle kan befinde sig i, og hvor langt kædernes ender typisk er fra hinanden, hvis hver konfiguration er lige sandsynlig. Den selvundvigende vandring kan modellere polymermolekyler, idet man forestiller sig, at polymermolekylet opbygges en enhed af gangen, og der ikke må befinde sig to enheder i samme punkt i rummet. For fysikere og kemikere er det således relevant at kende antallet af selvundvigende vandringer, som tager et givet antal skridt.

---

<sup>1</sup>I kapitel 2 gives en præcis definition af den selvundvigende vandring og andre relevante begreber, såsom de forskellige gittertyper.

<sup>2</sup>Lidt slagordsagtig kan en markovkæde defineres som en stokastisk proces, hvis fremtid kun afhænger af nutiden, og ikke af fortiden.

Et af de vigtigste problemer, måske ligefrem det vigtigste problem, i forbindelse med den selvundvigende vandring er altså

Hvor mange  $n$ -skridt selvundvigende vandringer eksisterer der?

Dette antal benævnes  $c_n$ .

På trods af at spørgsmålet oprindeligt opstod i kemien, er det af graf-teoretisk karakter, og er i virkeligheden et matematisk spørgsmål. Svaret er let at finde for små  $n$ . Man kan ved simpel optælling på en computer finde antallet af forskellige selvundvigende vandringer på et gitter op til  $n$  lig 10-50 alt afhængig af gitteret (se tabel 1.1). For større  $n$  er det noget sværere at bestemme  $c_n$ .

**Tabel 1.1** Eksakte optællinger af  $c_n$ . [Hughes, H.D., 1995]

$d = 2$	Bikube	$z = 3$	$c_{42} = 660\,671\,299\,170$
	Kagomé	$z = 4$	$c_{13} = 558\,832$
	Kvadratisk	$z = 4$	$c_{39} = 113\,101\,676\,587\,853\,932$
	Trekant	$z = 6$	$c_{13} = 138\,825\,972\,053\,046$
$d = 3$	Hydrogen peroxid	$z = 3$	$c_{30} = 1\,180\,825\,386$
	Diamant	$z = 4$	$c_{27} = 5\,243\,388\,472\,212$
	Hypertrekant	$z = 6$	$c_{14} = 3\,719\,252\,820$
	Simpel kubisk	$z = 6$	$c_{23} = 5\,245\,988\,215\,191\,414$
	Body-centred kubisk	$z = 8$	$c_{16} = 19\,731\,335\,857\,592$
	Face-centered kubisk	$z = 12$	$c_{12} = 1\,791\,455\,071\,068$
$d = 4$	Simpel hyperkubisk	$z = 8$	$c_{18} = 1\,271\,271\,096\,363\,128$
$d = 5$	Simpel hyperkubisk	$z = 10$	$c_{13} = 2\,450\,291\,960\,890$

Det er muligt at komme frem til nogle simple analytiske resultater om den selvundvigende vandring og den klasse af problemstillinger, som den tilhører. Disse resultater er fundet ved metoder, der stammer fra kombinatorik og matematisk fysik. For større  $n$  er det bevist at antallet af selvundvigende vandringer, som tager  $n$  skridt, har en asymptotisk grænse

$$c_n \sim f(n)\mu^n \quad (1.1)$$

hvor  $\log f(n) = o(n)$ . Konstanten  $\mu$  kaldes for gitterets forbindelseskonstant<sup>3</sup>, og er helt central i studiet af den selvundvigende vandring, pga. denne sammenhæng med  $c_n$ . Man har endnu ikke bestemt forbindelseskonstantens eksakte værdi for noget gitter ved brug af stringente matematiske metoder. Der findes dog et eksakt resultat, som giver værdien af et ikke-trivielt gitters forbindelseskonstant. Med denne baggrund kan projektets problem defineres.

<sup>3</sup>En fordanskning af *connective constant*.



## 1.1 Projektets problem

Den hollandske fysiker B. Nienhuis har bestemt værdien af bikubegitterets forbindelseskonstant eksakt

$$\mu = \sqrt{2 + \sqrt{2}}, \text{ for bikubegitteret} \quad (1.2)$$

Det er værd at bemærke, at bikubegitteret er det simpleste ikke-trivielle 2-dimensionale gitter, i den forstand at antallet af den selvundvigende vandings valgmuligheder ved hvert gitterpunkt er minimal i dette gitter. Resultatet i ligning 1.2 fremkommer ved at koble den selvundvigende vandring på bikubegitteret til en teoretisk fysisk model. Denne kobling sker ved brug af et resultat, som bygger på en antagelse om, at man kan betragte dimensionen af en vektor som en parameter og lade den gå mod nul. Nienhuis' resultat er velkendt blandt folk som beskæftiger med den selvundvigende vandring, og betegnes af alle som korrekt. I følge matematikere er metoden ikke stringent. Man står således i en situation hvor man har et matematisk problem, som man v.h.a. numeriske resultater og ikke-stringente metoder kender løsningen af, men som ikke kan vises på en matematiske acceptabel måde.

På denne baggrund vil vi undersøge Nienhuis' metode fra en matematisk synsvinkel, og har således valgt følgende problemformulering

**Hvordan adskiller Nienhuis' metode sig fra matematisk stringente metoder.**

Det vi finder interessant at undersøge i denne problemformulering, er de forskellige metoders stringens og anvendelsesmuligheder, og hvorvidt metodernes resultater er gyldige og korrekte. Dette kræver en præcis definition af den selvundvigende vandring og et bevis for forbindelseskonstantens eksistens, da det ellers er absurd at undersøge dens værdi. Der er ingen matematiske metoder, som giver en eksakt værdi af forbindelseskonstanten, men vi har beskrevet de metoder, som formodentlig giver de bedste grænser for forbindelseskonstantens værdi. Nienhuis' metode bygger på statistisk mekanik, så vi har fundet det nødvendigt at give en kortfattet introduktion til denne fysiske teoribygning. Selve metoden er publiceret i fysiske tidsskrifter, hvilket betyder at den ikke er beskrevet matematisk stringent. Vi har derfor forsøgt at gøre beskrivelsen mere matematisk, ved at udfylde hullerne i Nienhuis' temmelig kondenserede argumentation. Målet med denne udfoldelse af metoden er at sætte os i stand til at afgøre, hvor argumentationen ikke er matematisk stringent.

## 1.2 Er den selvundvigende vandring interessant?

Man kan undre sig over, hvorfor man i et matematikprojekt beskæftiger sig med et problem, som i første omgang stammer fra fysik, og nu er løst ved

brug af fysiske argumenter. I vores øjne er den selvundvigende vandring et eksemplarisk matematisk problem i mange henseender. For det første er dens definition simpel, og kan formuleres uden brug af kompliceret matematik samtidig med, at den åbenbart kun kan løses eksakt ved brug af underlige argumenter og kompliceret matematik. Derudover har den selvundvigende vandring en direkte anvendelse inden for andre videnskaber. Den bruges ikke længere kun til at modellere polymere, men f.eks. også i forbindelse med modellering af magnetiske stoffer.

I forordet til sin bog om perkolationsteori er matematikeren Harry Kesten inde på hvorfor perkolationsteori er interessant at beskæftige sig med. Han skriver

*Quite apart from the fact that percolation theory had its origin in an honest applied problem... it is a source of fascinating problems of the best kind a mathematician can wish for. Problems which are easy to state with a minimum of preparation, but whose solutions are (apparently) difficult and require new methods. At the same time many of the problems are of interest to or proposed by statistical physicists and not dreamt up merely to demonstrate ingenuity.*[Kesten, H., 1982]

I citatet kan ordet perkolationsteori erstattes med den selvundvigende vandring, for denne er interessant af præcis de samme årsager.

Kemikere og fysikeres interesse i at få etableret det kendte resultat på et matematisk stringent grundlag, er derimod mere tvivlsom. Som Gordon Slade skriver

*Chemists and physicists can't always afford to wait for rigorous proofs when they need results, and this is the case for the self-avoiding walk.*[Slade, G., 1994]

Denne situation gør, at resultater som endnu ikke er vist på en ordentlig måde af matematikere, i vid udstrækning er accepteret af kemikere og fysikere, og deres interesse i stringente beviser er nok ikke særlig stor.

Udover at den selvundvigende vandring er interessant fra et matematisk synspunkt, er vi motiveret af en mere overordnet problemstilling. Den selvundvigende vandring illustrerer nemlig forskellen mellem teoretisk fysik og matematik, dels fordi den selvundvigende vandring har sin oprindelse i fysik/kemi, dels fordi det eksakte bud på en værdi for forbindelseskonstanten stammer fra fysikken. Groft sagt mener fysikere ikke at der er problemer med Nienhuis' metode, mens matematikere påpeger at den ikke er stringent. Undersøgelsen af Nienhuis' argumentation åbner således for en diskussion af forskellen mellem de metoder, der anvendes indenfor matematik og teoretisk fysik. Denne problemstilling behandler vi ikke fra en systematisk og videnskabssteoretisk synsvinkel, men nøjes med at tage den op i diskussionen til sidst i rapporten.

## 2 Grundlæggende begreber

I dette kapitel ses der lidt nærmere på definitionen af den selvundvigende vandring, og hvordan forbindelseskonstanten, som blev introduceret i indledningen, kommer ind i billedet. Dels gives et bevis for forbindelseskonstanten eksistens, og dels gives nogle resultater vedrørende forbindelseskonstanten.

### 2.1 Gitre

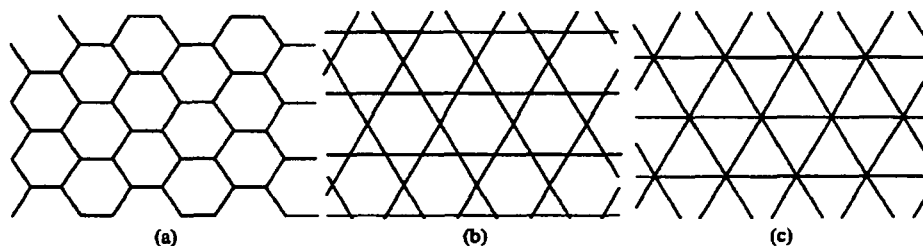
Gitre er ofte den underliggende struktur i matematiske modeller i både kontinuerte og diskrete rum. De kontinuerte systemer, som beskrives ved brug af gitre, simplificeres herved til diskrete modeller, mens det er mere naturligt at beskrive mange diskrete systemer ved brug af gitre. Gitteret systematiserer strukturen i systemet som den matematiske model beskriver, og gør den nemmere at håndtere og forstå.

Gitre beskriver alt fra gader i byer til molekylære strukturer til mere abstrakte strukturer som for eksempel den interne lederstruktur i et selskab. Gitre har således deres anvendelse inden for alle videnskaber og på mange abstraktionsniveauer. Gitre danner i projektet grundlag for den selvundvigende vandrings domæne, og er således helt central for forståelsen af problematikken.

Et gitter eller en graf  $\mathcal{L}(V, E)$  er matematisk defineret som en mængde af punkter  $V = \{v_1, v_2, \dots\}$ , som kaldes for gitterpunkter og en mængde af (uordnede) punktpar  $E$ , som kaldes bånd. Gitterpunkterne betragtes ofte som punkter i et passende rum, mens båndene betragtes som forbindelser eller linier mellem disse punkter. To punkter  $v$  og  $v'$ , som er direkte forbundet med et bånd, kaldes for nærmeste naboer; mens to punkter i et gitter siges at være indirekte forbundet hvis der eksisterer en mængde af bånd i gitteret som forbinder de to punkter. Et gitterpunkts koordinationstal angiver antallet af nærmeste naboer. Har alle punkter i gitteret samme koordinationstal associeres dette koordinationstal til gitteret, og kaldes for gitterets koordinationstal  $z$ . De gitre vi bruger har alle fast koordinationstal, som også kaldes homogene gitre.

De mest anvendte gittertyper kan naturligt beskrives i en passende delmængde af det diskrete  $d$ -dimensionale euklidiske rum  $\mathbf{Z}^d$ . Gitteret består da af gitterpunkter med heltallige koordinater, og bånd der er linier mellem par af gitterpunkter, som er nærmeste naboer. Det mest åbenlyse gitter man således kan forestille sig, består af samtlige punkter i  $\mathbf{Z}^d$  med bånd mellem

alle gitterpunkter, som er netop en enhed fra hinanden. Dette kaldes for det  $d$ -dimensionelle simple hyperkubiske gitter, som har koordinationsstallet  $z = 2d$ . I to og tre dimensioner er det henholdsvis de velkendte kvadratiske og kubiske gitre. De tre gitre i planen, som anvendes i projektet, er gengivet i figur 2.1.

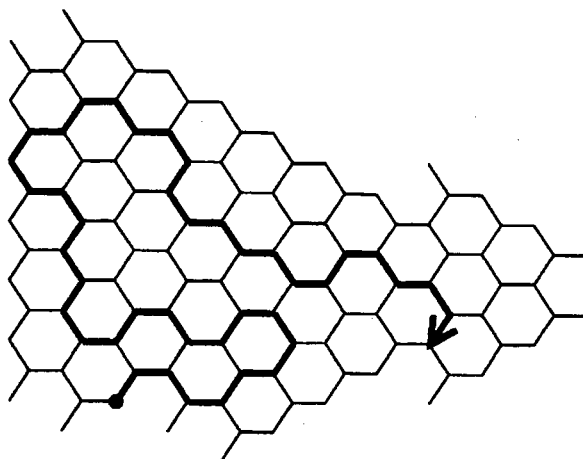


**Figur 2.1** (a) Bikubegitter eller hexagonalt gitter med  $z = 3$ . (b) Kagomé-gitter med  $z = 4$ . (c) Trekantsgitter med  $z = 6$ .

Et gitter kaldes periodisk, hvis der eksisterer en ikke-tom mængde af gittervektorer  $\{\mathbf{b}_j\}$ , således at gitteret afbildes over i sig selv ved en arbitrær translation med disse,  $\sum_j m_j \mathbf{b}_j$ , hvor  $m_j$  er et heltal. Periodiske gitre er således invariante, når der translateres med gittervektorerne. Antallet af lineært uafhængige gittervektorer definerer gitrets dimension. Periodiske gitre kaldes til tider for krystalgitre. I det følgende er alle gitre periodiske, og kaldes blot for gitre.

### 2.1.1 Diagrammer på gitre

Et diagram på et gitter er defineret som en delmængde af gitteret, og består af en punktmængde og en mængde af punktpar. Punktmængden er den samme for gitteret og diagrammet, så diagrammet indeholder samtlige gitterpunkter. Diagrammets mængde af punktpar er en delmængde af gitterets, dvs. diagrammet indeholder i det generelle tilfælde færre bånd end gitteret. Et bånd i et diagram kaldes for en væg, idet man forestiller sig, at der ovenpå gitteret konstrueres vægge i de bånd, som er inkluderet i diagrammet. Et diagram opdeler således gitterpunkterne i klasser, så gitterpunkter, som er indirekte forbundet med vægge, tilhører samme klasse. Klasserne kaldes i grafteorien for komponenter. Et diagram hvor mængden af punktpar består af *ordnede* punktpar, kaldes et orienteret diagram. Ved at placere pile på nogle af gitterets bånd, dannes et orienteret diagram og vi skelner ikke mellem orienterede diagrammer og pile på gitteret. Skriver vi diagram, mener vi blot et ikke-orienteret diagram, dvs. et diagram hvor elementerne i mængden af punktpar ikke er ordnede par.



Figur 2.2 En selvundvigende vandring på bikubegitteret på 42 skridt.

### 2.1.2 Vandring på gitre

En  $n$ -skridt vandring  $\omega$  på et gitter er defineret som en ordnet mængde af  $n + 1$  gitterpunkter  $\{v_0, v_1, \dots, v_n\}$ , hvor  $v_0$  og  $v_n$  er henholdsvis første og sidste punkt i vandringen, og der for alle  $i$  gælder, at  $v_i$  og  $v_{i+1}$  er nærmeste naboer. En random walk er en vandring, som opfylder følgende betingelse: Befinder vandringen sig i  $v_i$  i det  $n$ 'te skridt, kan den i næste skridt befinde sig i  $v_i$ 's nærmeste naboer med samme sandsynlighed.

## 2.2 Den selvundvigende vandring

Vi er nu i stand til at definere den selvundvigende vandring. En vandring kaldes selvundvigende, hvis alle gitterpunkterne i vandringen  $\{v_0, \dots, v_n\}$  er forskellige. Mængden bestående af alle  $n$ -skridt selvundvigende vandringer betegnes  $\mathcal{S}_n$ , og dennes kardinalitet betegnes  $c_n$ . Hvis  $v_0, \dots, v_{n-1}$  er forskellige og  $v_n = v_0$ , kaldes vandring for en  $n$ -skridt selvundvigende polygon. Hvis et gitter er homogent, afhænger antallet af selvundvigende vandringer, ikke af, hvilket gitterpunkt vandringen begynder i.

### 2.2.1 Sammenkædning af selvundvigende vandringer

Vandringen  $\omega$ , der dannes ved sammenkædningen  $\omega = \omega_1 \circ \omega_2$  af to selvundvigende vandringer  $\omega_1 = \{w_0, \dots, w_n\}$  og  $\omega_2 = \{u_0, \dots, u_m\}$  med samme udgangspunkt ( $w_0 = u_0$ ) på henholdsvis  $n$  og  $m$  skridt, er defineret ved

$$\omega = \{v_0, \dots, v_n, v_{n+1}, \dots, v_{n+m}\} \quad (2.1)$$

$$= \{w_0, \dots, w_n, w_n + u_1, \dots, w_n + u_m\} \quad (2.2)$$

En sammenkædning af to selvundvigende vandring er defineret altså en vandring, som starter med den givne vandring  $\omega_1$ , og fortsætter sin vandring, ved en translation af den selvundvigende vandring  $\omega_2$  til det sidste punkt i  $\omega_1$ 's vandring,  $w_n$ . Vandringen  $\omega$  er ikke nødvendigvis selvundvigende, men dette vil afhænge af de enkelte vandring  $\omega_1$  og  $\omega_2$ 's detaljer.

En mængde  $\mathcal{A}_{n+m}$  bestående af alle vandring på  $n+m$  skridt der dannes ved sammenkædningen af to selvundvigende vandring på henholdsvis  $n$  og  $m$  skridt, har kardinaliteten  $c_n c_m$ . Denne mængde indeholder alle selvundvigende vandring på  $n+m$  skridt, samt nogle vandring på  $n+m$  skridt der ikke er selvundvigende. Da mængden af selvundvigende vandring på  $n+m$  skridt er en delmængde af  $\mathcal{A}_{n+m}$  gælder der at

$$c_{n+m} \leq c_n c_m \quad (2.3)$$

Lighed i ligningen gælder kun når  $n$  eller  $m$  er nul.

### 2.2.2 Forbindelseskonstanten

Et af de vigtigste resultater indenfor teorien for den selvundvigende vandring, er Hammersley-Mortons sætning.

#### Sætning 2.1 (Hammersley-Mortons sætning)

Lad  $c_n$  være antallet af selvundvigende vandring, som går  $n$  skridt på et periodisk gitter. Antag at for alle  $n$  er  $c_n$  mindst 1. Så gælder at grænsen

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log c_n = \log \mu \quad (2.4)$$

eksisterer. Desuden gælder følgende ulighed for alle værdier af  $n$

$$\mu \leq c_n^{1/n} \quad (2.5)$$

Grænseværdien  $\mu$  kaldes for forbindelseskonstanten.

Hammersley-Mortons sætning bevises ved brug af følgende lemma.

#### Lemma 2.2 (om subadditive følger)

For en følge af positive reelle tal  $\{a_n\}_{n \geq 1}$ , som er subadditiv, dvs.  $a_{n+m} \leq a_n + a_m$ , eksisterer grænsen  $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} a_n$ , og er givet ved

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} = \inf_{n \geq 1} \frac{a_n}{n} \quad (2.6)$$

#### Bevis

Lad  $\{a_n\}_{n \geq 1}$  betegne en følge af positive reelle tal som er subadditiv. Antag at  $k$  er givet og lad  $A_k$  betegne det største element i de  $k$  første elementer i følgen  $\{a_n\}_{n \geq 1}$ , dvs.

$$A_k = \max_{1 \leq r \leq k} a_r \quad (2.7)$$

Givet et positivt heltal  $n$ , defineres  $j$  som det største heltal der opfylder  $j < \frac{n}{k}$ . Da gælder at  $n = jk + r$ , hvor  $1 \leq r \leq k$ . Benyttes at  $a_n$  er subadditiv fås

$$a_n \leq a_{jk} + a_r \leq ja_k + a_r \leq \frac{n}{k}a_k + A_k \quad (2.8)$$

Ved at dividere med  $n$  fås

$$\frac{a_n}{n} \leq \frac{a_k}{k} + \frac{A_k}{n} \quad (2.9)$$

Tager vi  $\limsup_{n \rightarrow \infty}$  på begge sider, når vi frem til

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{a_k}{k} + \frac{A_k}{n} \right) = \frac{a_k}{k} \quad (2.10)$$

Da  $k$  er vilkårligt valgt får vi

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \leq \inf_{k \geq 1} \frac{a_k}{k} \quad (2.11)$$

Der gælder

$$\inf_{k \geq 1} \frac{a_k}{k} \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \quad (2.12)$$

og

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \quad (2.13)$$

Sammen med ligning 2.11 giver disse to ligninger

$$\inf_{k \geq 1} \frac{a_k}{k} \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \leq \inf_{k \geq 1} \frac{a_k}{k} \quad (2.14)$$

Denne ligning betyder at  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n}$  eksisterer og er givet ved ligning 2.6.  $\square$

### Bevis for Hammersley-Mortons sætning

Ved at tage logaritmen i ligning 2.3 fås

$$\log c_{n+m} \leq \log c_n + \log c_m \quad (2.15)$$

hvilket viser at følgen  $\{\log c_n\}_{n \geq 1}$  er subadditiv og positiv. I følge lemma 2.2 eksisterer grænseværdien af  $\log c_n/n$  og er givet ved

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log c_n}{n} = \inf_{n \geq 1} \frac{\log c_n}{n} \quad (2.16)$$

Forbindelseskonstanten  $\mu$  indføres som

$$\log \mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log c_n}{n} \quad (2.17)$$

Da

$$\log \mu = \inf_{n \geq 1} \frac{\log c_n}{n} \quad (2.18)$$

gælder der for alle  $n$

$$\log \mu \leq \frac{\log c_n}{n} \quad (2.19)$$

Dette viser uligheden 2.5.  $\square$

Påstanden i sætningen er ækvivalent med relationen

$$c_n \sim f(n) \mu^n \quad (2.20)$$

hvor  $f(x) \sim g(x)$  betyder at  $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x)/g(x) = 1$  og  $\log f(n) = o(n)$ .

Ligning 2.20 er i overensstemmelse med et mere generelt resultat, som *formodes* at være rigtigt

$$c_n \sim A \mu^n n^{\gamma-1} \quad (2.21)$$

$A$ ,  $\mu$  og  $\gamma$  er dimensionsafhængige positive konstanter.  $\gamma$  betegnes en kritisk eksponent pga. en sammenhæng med kritiske fænomener indenfor statistisk mekanik.

Den kritiske eksponent er afhængig af dimensionen, men *formodes* at være uafhængig af gitteret som vandringen forgår i. F.eks. *formodes* det, at eksponenten er den samme for det kvadratiske og det trekantede gitter. Denne mangel på afhængighed af modellens detaljerede definition kaldes universalitet. Værdien af  $\gamma$  menes at være fastsat for alle dimensioner.

$$\gamma = \begin{cases} \frac{43}{62} & d = 1 \\ 1,162 & d = 2 \\ 1 & d = 3 \text{ med logaritmiske korrektioner} \\ 1 & d \geq 4 \end{cases} \quad (2.22)$$

Disse værdier er fastsat ved brug af statistisk mekaniske metoder, som vi ikke vil komme nærmere ind på, og er i overensstemmelse med numeriske resultater.

Forbindelseskonstanten kan betragtes som et effektivt koordinationsstal og er ikke universelt, for det afhænger dels af gitteret, og dels af dimensionen. Der findes ikke noget stringent bevis for ligning 2.21, men det er ifølge Madras og Slade (1993) understøttet af numeriske og ikke-stringente resultater, hovedsageligt fra statistisk mekanik.



## 3 Forbindelseskonstantens nedre og øvre grænser

Der findes adskillige stringente matematiske metoder til at bestemme både nedre og øvre grænser for forbindelseskonstanten  $\mu$ . I dette kapitel beskriver vi to af disse metoder, en som giver en nedre grænse for  $\mu$  [Fisher & Sykes, 1959], og en som giver en øvre grænse [Alm, S.E., 1991]. Vi har ikke foretaget et fuldstændigt litteraturstudium for at finde frem til de metoder, som giver de kraftigste begrænsninger. Vi har slået os til tåls med, at Fisher og Sykes' grænse refereres som den bedste nedre grænse i et oversigtsværk [Hughes, H.D., 1995], mens Alms værdi er en forbedring af den værdi, Hughes refererer til som den bedste øvre grænse.

En anden tilgang til at finde grænser for  $\mu$  benytter statistiske metoder, som f.eks. Monte Carlo simuleringer. Ved en sådan metode er der dog en usikkerhed forbundet, som er større end den usikkerhed, man har ved den analytiske tilgang [Fisher & Sykes, 1959]. Vi vil ikke beskrive disse statistiske metoder, men henvise til [Hughes, H.D., 1995].

### 3.1 Primitive metoder

Hammersley-Mortons sætning kan bruges til at opstille en øvre grænse for  $\mu$ , idet der ifølge sætningen gælder for alle  $n$  at

$$\mu \leq c_n^{1/n} \quad (3.1)$$

Følgen  $\{c_n^{1/n}\}_{n \geq 1}$ , mener man, er monotont aftagende, men dette er ikke bevist [Alm, S.E., 1991]. Ved at optælle antallet af  $n$ -skridt selvundvigende vandring for en tilpas stor værdi af  $n$  og indsætte i ligning 3.1, kan  $\mu$  vurderes. Man har talt  $c_n$  op til  $n = 42$  på bikubegitteret, [Hughes, H.D., 1995], og er nået frem til

$$c_{42} = 660\,671\,299\,170 \quad (3.2)$$

Dette giver følgende øvre grænse for  $\mu$  på bikubegitteret

$$\mu \leq \sqrt[42]{c_{42}} = 1,912 \quad (3.3)$$

Dette er en primitiv metode til at opstille en øvre grænse for  $\mu$ , og der findes andre mere avancerede metoder, som giver et bedre resultat.

En primitiv metode til at opstille en nedre grænse for  $\mu$  er baseret på, at der for alle  $n$  eksisterer mindst en selvundvigende vandring, så  $\mu$  er større end 1. De primitive metoder giver således, at bikubegitterets forbindelseskonstant opfylder

$$1 \leq \mu \leq 1,912 \quad (3.4)$$

Det er dog muligt at opnå bedre resultater ved mere analytiske tilgange, som vi nu vil beskrive.

### 3.2 Fisher og Sykes' metode

En metode til at finde en nedre grænse for værdien af  $\mu$  er lavet af Fisher og Sykes i 1959 [Fisher & Sykes, 1959]. Den bygger på følgende sætning.

#### Sætning 3.1

Lad  $\{\mathcal{A}_n\}_{n \geq 1}$  betegne en følge af mængder, hvor  $\mathcal{A}_n$  består af selvundvigende vandring, som går  $n$  skridt. Kardinaliteten af  $\mathcal{A}_n$  betegnes  $a_n$ . Hvis grænsen  $\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{a_{n+1}}{a_n} \right)$  eksisterer, er  $\lambda \leq \mu$ .

#### Bevis

Da mængden  $\mathcal{A}_n$  er en delmængde af  $\mathcal{S}_n$  gælder der for alle  $n$  at  $a_n \leq c_n$ . Dette er i modstrid med følgende antagelse. Antag at grænsen  $\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{a_{n+1}}{a_n} \right)$  eksisterer, og at  $\lambda > \mu$ . Da er

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n+1}}{a_n} > \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{c_{n+1}}{c_n} = \mu \quad (3.5)$$

Dvs. der findes  $\rho_1$  og  $\rho_2$ , så

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n+1}}{a_n} > \rho_1 > \rho_2 > \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{c_{n+1}}{c_n} \quad (3.6)$$

Dette betyder, at der eksisterer et  $N$ , så der for alle  $n > N$  gælder

$$a_{n+1} > \rho_1 a_n \text{ og } c_n \rho_2 > c_{n+1} \quad (3.7)$$

En omskrivning giver

$$\frac{a_{n+1}}{c_{n+1}} > \frac{\rho_1 a_n}{\rho_2 c_n} \quad (3.8)$$

og derfor

$$\frac{a_{n+k}}{c_{n+k}} > \left( \frac{\rho_1}{\rho_2} \right)^k \frac{a_n}{c_n} \quad (3.9)$$

Da  $\frac{\rho_1}{\rho_2} > 1$ , kan vi vælge  $k$  så stor at

$$\left( \frac{\rho_1}{\rho_2} \right)^k > \frac{c_n}{a_n} \quad (3.10)$$

Dette betyder at for dette  $k$ , er

$$\frac{a_{n+k}}{c_{n+k}} > 1 \quad (3.11)$$

Dette giver en modstrid med  $a_m \leq c_m$ , så  $\lambda \leq \mu$ .  $\square$

Sætningen fortæller os, at hvis vi kan bestemme en grænseværdi for følgen  $\left\{ \frac{a_{n+1}}{a_n} \right\}_{n \geq 1}$  (en slags forbindelseskonstant), hvor  $a_n$  er kardinaliteten af en delmængde af  $\mathcal{S}_n$ , er den en nedre grænse for  $\mu$ . Vi kan således finde en grænse for  $\mu$  ved at konstruere en følge af mængder bestående af selvundvigende vandringer, hvis kardinalitet vi kan bestemme eksakt. I forbindelse med bikubegitteret er det praktisk kun at betragte mængder bestående af vandringer, som tager et lige antal skridt.

En triviel følge af delmængder af  $\mathcal{S}_n$  er den vandring, som kun går i en retning. Kardinaliteten af denne delmængde er 1, uanset hvilket gitter man betragter, men dette giver kun det trivielle resultat at  $\mu \geq 1$ .

Et bedre resultat fås ved at betragte følgen af mængder bestående af vandringer, som er begrænset til at foretage de skridt, som er angivet i figur 3.1. I disse skridt vender vandringen ikke om, idet vandringen enten fortsætter i samme retning, dvs. op eller ned, eller går et skridt til højre og derefter op eller ned. Dette sikrer at vandringen er selvundvigende; og en mængde bestående af sådanne vandringer er derfor en delmængde af  $\mathcal{S}_n$ . Kardinaliteten  $d_n$  af denne delmængde af  $\mathcal{S}_n$  kan bestemmes ved følgende rekursive ligning

$$d_{n+2} = 3d_n \quad (3.12)$$

I følge [Lindstrøm, T., 1995] har ligningen løsninger af formen  $d_n = A\lambda^n$ , så

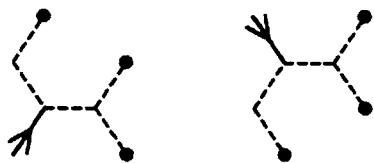
$$\lambda^{n+2} = 3\lambda^n \quad (3.13)$$

$$\lambda^2 - 3 = 0 \quad (3.14)$$

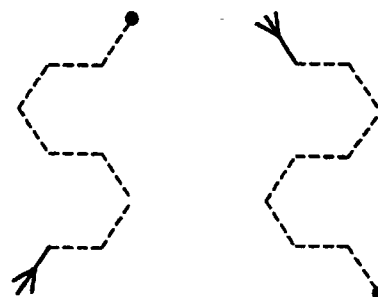
Da vi ønsker en nedre grænse for  $\mu$ , vælger vi den største rod af dette polynomium. Ved denne simple vandring fås således en nedre grænse for  $\mu$  på  $\mu \geq \lambda = \sqrt{3} = 1,7321$ .

For at forbedre denne grænse kan man tillade vandringen flere typer skridt, f.eks. som på figur 3.2. Vandringen kan lave et lille 'kink' hvor den i to skridt går frem, dernæst tilbage i to skridt, for derefter at bevæge sig op i to skridt og så frem igen i de sidste to skridt. Mængden som består af vandringer, som både må lave et sådant 'kink' og tage skridtene som vist på figur 3.1, er større end den foregående mængde. En vandring i denne mængde, som befinder sig i et gitterpunkt, kan være kommet der på to måder. Enten ved en vandring af to skridt eller en vandring som har foretaget et 'kink' gennem de sidste 8 skridt. Kardinaliteten af denne mængde er derfor givet ved den rekursive ligning

$$d_{n+2} = 3d_n + d_{n-6} \quad (3.15)$$



**Figur 3.1** Tilladte skridt for en delmængde af  $\mathcal{S}_n$ . Vandringen har bevæget sig langs den optrukne linie til et gitterpunkt. Fra dette gitterpunkt har den tre valgmuligheder for de næste to skridt, fordi den ikke må gå tilbage. Disse muligheder er markeret med stiplede linier, som ender i en prik.



**Figur 3.2** Et 8-skridt 'kink'. Vandringen har bevæget sig langs den optrukne linie til et gitterpunkt. Fra dette gitterpunkt har den mulighed for bevæge sig langs den stiplede linie eller foretage de skridt, som er angivet i figur 3.1.

Denne ligning har ligeledes løsninger af formen  $d_n = A\lambda^n$  [Lindstrøm, T., 1995], så

$$\begin{aligned}\lambda^{n+2} &= 3\lambda^n + \lambda^{n-6} \\ \lambda^8 - 3\lambda^6 - 1 &= 0\end{aligned}\quad (3.16)$$

Den største rod er  $\lambda = 1,74234$ , som er en bedre nedre grænse end den forrige. Man kan ved at tillade flere slags 'kinks' få en bedre nedre grænse på [Fisher & Sykes, 1959]

$$\mu > 1,7872 \quad (3.17)$$

Denne værdi er ifølge [Hughes, H.D., 1995] den bedste nedre grænse for  $\mu$  man har beregnet. En anden metode som giver samme resultater, og bygger på samme principper beskrives ligeledes af Fisher og Sykes. Metoden benytter sig af frembringende funktioner.

### 3.2.1 Frembringende funktioner

Metoden bestemmer en nedre grænse for  $\mu$  ud fra de tilladte skridt alene. Vi beskriver hver enkelt vandring ved et monomium, og laver et polynomium bestående af disse monomier. Hvis en vandring består af  $l$  skridt i  $x$ -retningen og  $m$  skridt i  $y$ -retningen er dets monomium givet som  $x^l y^m$ , og funktionen  $P(x, y)$  er defineret som følger

$$P(x, y) = \sum_{l, m} p_{lm} x^l y^m \quad (3.18)$$

Da der er flere end én vandring, som kan beskrives ved hvert monomium, angiver  $p_{lm}$  antallet af forskellige vandringer, som benytter netop  $l$  skridt i

$x$ -retningen og  $m$  skridt i  $y$ -retningen. Ved at sætte  $x = y = z$  og  $n = l + m$  skiftes der til én variabel, som beskriver hver enkelt vandring.  $P(x, y) = P(z)$  bliver da

$$P(z) = \sum_n p_n z^n \quad (3.19)$$

hvor  $p_n$  er antallet af  $n$ -skridt vandringer, svarende til  $c_n$ , når alle selvundvigende vandringer er inkluderet i polynomiet. Af rod-kriteriet fås at ligning 3.19 har en konvergensradius  $z_c$ , som er givet ved  $z_c = (\lim_{n \rightarrow \infty} p_n^{1/n})^{-1} = \frac{1}{\lambda}$ .

Anvendes metoden på den førstnævnte vandring i forrige afsnit, får vi

$$\begin{aligned} P(x, y) &= y^2 + y^4 + y^6 + \dots \\ &\quad + 2xy + 2xy^3 + 2xy^5 + \dots \\ &\quad + 4x^2y^2 + 4x^2y^4 + 4x^2y^6 + \dots \\ &\quad \vdots \\ &= \sum_n (y^2 + 2xy)^n = \sum_n \phi_0^n \end{aligned} \quad (3.20)$$

Summanden kan sammenlignes med figur 3.1, hvor to skridt op eller ned svarer til  $y^2$ , og et skridt til siden og derefter et skridt enten op eller ned svarer til  $2xy$ . Udtrykket  $\phi_0 = y^2 + 2xy$  kaldes for vandringens frembringende funktion. I ligning 3.20 sættes  $x = y = z$

$$P(z) = \sum_n (3z^2)^n \quad (3.21)$$

Konvergensradius bestemmes ved kendskab til konvergensradius for den geometriske række, dvs.  $3z_c^2 = 1$ . Af dette fås at  $z_c = \sqrt{1/3}$ , dvs.  $\lambda = \sqrt{3}$  svarende til værdien som blev fundet ved brug af den rekursive ligning (3.13).

Denne værdi kan gøres bedre ved at tillade vandringen at tage flere typer skridt. Det ekstra skridt, som er vist i figur 3.2, har sammen med de basale skridt i figur 3.1 den frembringende funktion

$$\phi_1 = y^2 + 2xy + x^3y^5 \quad (3.22)$$

Dette medfører en værdi af  $\lambda = 1,74234$ , svarende til værdien som blev opnået ved brug af den rekursive ligning 3.16. Ligesom ved den forrige metode kan man fortsætte med at indsætte flere og flere 'kinks', for på den måde at forbedre sin nedre grænse for  $\mu$ .

### 3.3 Alms metode

Alm angiver en metode til at bestemme en øvre grænse for forbindelseskonstanten  $\mu$  for den selvundvigende vandring på forskellige gitre. I afsnit 2.2.1

definerede vi sammenkædningen af selvundvigende vandringer. Det overordnede princip i Alms metode er at lave en delmængde  $\mathcal{K}_n$  af sådanne sammenkædede selvundvigende vandringer, som tager  $n$  skridt.  $\mathcal{K}_n$  konstrueres således, at mængden af selvundvigende vandringer,  $\mathcal{S}_n$ , er en delmængde af denne mængde og kardinaliteten af  $\mathcal{K}_n$  er større end  $c_n$ . Af Hammersley-Mortons sætning fremgår det at

$$\mu \leq c_n^{1/n} \quad (3.23)$$

så  $\mu$  er mindre end eller lig med den  $n$ 'te rod af kardinaliteten af  $\mathcal{K}_n$ . Alms metode udnytter de samme principper som de primitive metoder, men benytter nogle mere avancerede teknikker. Mere teknisk, udnytter Alm resultatet til at vise en sætning om at  $\mu$  er mindre end eller lig med en rod af den største egen værdi af en matrix,  $\mathbf{G}(m, n)$ . Inden vi viser denne sætning, er det nødvendigt med nogle begreber.

To gitterpunkter i gitteret opfattes som ækvivalente, hvis man kan afbilde den ene over i den anden ved en symmetrioperation (f.eks. translation, rotation eller refleksion) af gitteret. Det er oplagt at denne relation er en ækvivalensrelation. Alm sætning gælder for regulære gitre, dvs. gitre som opfylder, at alle gitterpunkter tilhører samme ækvivalensklasse, at antallet af bånd som udgår fra hvert hjørne er endeligt, og at alle gitterpunkter er indirekte forbundet.<sup>1</sup>

### 3.3.1 Princippet i metoden

Vi indfører en nummerering af de selvundvigende vandringer i  $\mathcal{S}_m$ , og lader  $\gamma_i(m)$  betegne den  $i$ 'te selvundvigende vandring, som tager  $m$  skridt, hvor  $i = 1, 2, 3, \dots, c_m$ . Som nævnt i afsnit 2.2.1 kan to sådanne vandringer,  $\gamma_i(m)$  og  $\gamma_j(m)$ , under visse omstændigheder sammenkædes til en  $n$ -skridt selvundvigende vandring, hvor de første  $m$  skridt udgøres af  $\gamma_i(m)$  og de sidste af en translation af  $\gamma_j(m)$ . Sammenkædningen af vandringer bruger vi til at indføre en  $c_m \times c_m$  matrix,  $\mathbf{G}(m, n)$ , når  $m < n$ . Elementet  $(i, j)$  i denne matrix,  $g_{ij}(m, n)$ , defineres som antallet af  $n$ -skridt selvundvigende vandringer, som starter med  $\gamma_i(m)$  og slutter med en translation af  $\gamma_j(m)$ . Hvis  $n > 2m$  skal der tilføjes en mellemliggende selvundvigende vandring på  $n - 2m$  skridt. Matricen  $\mathbf{G}(m, n)$  er positiv, men er ikke nødvendigvis symmetrisk.

Der eksisterer følgende sammenhæng mellem  $c_n$  og denne matrix

$$c_n = \sum_{i=1}^{c_m} \sum_{j=1}^{c_m} g_{ij}(m, n) \quad (3.24)$$

Dette indses på følgende måde:

<sup>1</sup>Alm viser sætningen for en mere generel klasse af gitre.

For et givet  $m$  kan enhver selvundvigende vandring som tager  $n$ -skridt stykkes sammen af to  $m$ -skridt selvundvigende vandringer  $\gamma_i(m)$  og  $\gamma_j(m)$  og eventuelt en tredje selvundvigende vandring. Hvis  $n < 2m$  skal  $\gamma_i(m)$  og  $\gamma_j(m)$  overlape i  $2m - n$  skridt, og hvis  $n > 2m$ , skal der tilføjes en tredje selvundvigende vandring i de midterste  $n - 2m$  skridt. Dette betyder at enhver  $n$ -skridt selvundvigende vandring regnes med i  $\mathbf{G}(m, n)$ . Der gælder derfor

$$c_n \leq \sum_{i=1}^{c_m} \sum_{j=1}^{c_m} g_{ij}(m, n) \quad (3.25)$$

På den anden side betegner  $g_{ij}(m, n)$  antallet af  $n$ -skridt selvundvigende vandringer som er konstrueret på en bestemt måde. Da man ikke tæller den samme  $n$ -skridt selvundvigende vandring med flere gange på højre side af ligning 3.25, gælder der at  $c_n$  er større end eller lig med venstre side

$$c_n \geq \sum_{i=1}^{c_m} \sum_{j=1}^{c_m} g_{ij}(m, n) \quad (3.26)$$

Sammen med ligning 3.25 betyder dette, at vi har vist ligning 3.24.

I det følgende definerer vi *normen* af en matrix  $(\mathbf{A})^{ij} = a_{ij}$ , hvis elementer alle er positive, som

$$\|\mathbf{A}\| = \sum_i \sum_j a_{ij} \quad (3.27)$$

Med denne notation kan ligning 3.24 omskrives til

$$c_n = \|\mathbf{G}(m, n)\| \quad (3.28)$$

Den største egen værdi for  $\mathbf{A}$  giver vi symbolet  $\lambda_1(\mathbf{A})$ , og den er positiv og reel i følge en sætning fra [Karlin & Taylor, 1975]. Der gælder en sammenhæng mellem normen for en positiv, kvadratisk matrix  $\mathbf{A}$  og dens største egen værdi  $\lambda_1(\mathbf{A})$

$$\lambda_1(\mathbf{A}) = \lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{A}^k\|^{1/k} \quad (3.29)$$

Denne sætning viser vi ligeledes ikke, men der findes et bevis i [Horn & Johnson, 1985]. Vi er nu klar til at bevise den sætning, som er kernen i metoden.

### Sætning 3.2

Forbindelseskonstanten  $\mu$  for selvundvigende vandringer på et regulært gitter opfylder følgende ulighed

$$\mu \leq (\lambda_1(\mathbf{G}(m, n)))^{1/(n-m)} \quad (3.30)$$

hvor  $\lambda_1(\mathbf{G}(m, n))$  er den største egen værdi for matrixen  $\mathbf{G}(m, n)$ .

**Bevis**

Betragt to  $n$ -skridt selvundvigende vandring, hvor den ene starter med  $\gamma_i(m)$  og slutter med  $\gamma_k(m)$ , mens den anden starter med  $\gamma_k(m)$  og slutter med  $\gamma_j(m)$ . Ved at translaterer på passende vis sammenkædes disse to vandring, sådan at  $\gamma_k(m)$ -delen overlapper. På denne måde skabes en ny vandring, som har længden  $2n - m = m + 2(n - m)$ , som starter med  $\gamma_i(m)$  og slutter med  $\gamma_j(m)$ . Denne vandring er ikke nødvendigvis selvundvigende, men enhver selvundvigende vandring som starter med  $\gamma_i(m)$  og slutter med  $\gamma_j(m)$  og går  $2n - m$  skridt, kan skabes på denne måde ved at skyde en passende vandring  $\gamma_k$  ind. Der gælder derfor

$$g_{ij}(m, 2n - m) = g_{ij}(m, m + 2(n - m)) \leq \sum_{k=1}^{c_m} g_{ik}(m, n)g_{kj}(m, n) \quad (3.31)$$

Summen på højre side svarer til element  $(i, j)$  i matricen  $\mathbf{G}^2(m, n)$ . I stedet for at sammenkæde to  $n$ -skridt selvundvigende vandring, sammenkæder vi  $r$   $n$ -skridt selvundvigende vandring til én lang, således at der er  $(r - 1)m$  overlappende skridt. Dette giver uligheden

$$g_{ij}(m, m + r(n - m)) \leq (\mathbf{G}^r(m, n))_{ij} \quad (3.32)$$

Dette vises ved et induktionsbevis. Antag at uligheden gælder for  $r$ , så skal vi vise, at den gælder  $r + 1$ . Vi betragter derfor

$$g_{ij}(m, m + (r + 1)(n - m)) = g_{ij}(m, m + r(n - m) + (n - m)) \quad (3.33)$$

Dette er antallet af selvundvigende vandring, som tager  $m + (r + 1)(n - m)$  skridt, og starter med  $\gamma_i(m)$  og slutter med en translation af  $\gamma_j(m)$ . Betragt to selvundvigende vandring: en som tager  $m + (n - m)$  skridt, og som starter med  $\gamma_i(m)$  og slutter med  $\gamma_k(m)$ , og en  $(m + r(n - m))$ -skridt selvundvigende vandring, som starter med  $\gamma_k(m)$  og slutter med  $\gamma_j(m)$ . Som før kan en  $(m + (r + 1)(n - m))$ -skridt selvundvigende vandring, ved et passende valg af  $\gamma_k(m)$ , sammenkædes af disse to vandring. Der gælder derfor

$$g_{ij}(m, m + (r + 1)(n - m)) \leq \sum_k g_{ik}(m, n)g_{kj}(m, m + r(n - m)) \quad (3.34)$$

Induktionsantagelsen giver

$$g_{ij}(m, m + (r + 1)(n - m)) \leq \sum_k g_{ik}(m, n)(\mathbf{G}^r(m, n))_{kj} \quad (3.35)$$

$$= (\mathbf{G}^{r+1}(m, n))_{ij} \quad (3.36)$$

og vi har vist uligheden 3.32.

Da argumentet er uafhængig af elementet  $(i, j)$  i  $\mathbf{G}(m, n)$  gælder der

$$\|\mathbf{G}(m, m + r(n - m))\| \leq \|\mathbf{G}^r(m, n)\| \quad (3.37)$$



Forbindelseskonstanten  $\mu$  kan bestemmes ved

$$\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} c_n^{1/n} \quad (3.38)$$

Ved at indsætte ligning 3.28 kan denne ligning omskrives til

$$\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{G}(m, n)\|^{1/n}. \quad (3.39)$$

At lade antallet af skridt gå mod uendelig svarer til at lade  $r$  gå mod uendelig, så  $\mu$  kan vurderes ved uligheden

$$\mu = \lim_{r \rightarrow \infty} \|\mathbf{G}(m, m+r(n-m))\|^{1/(m+r(n-m))} \leq \lim_{r \rightarrow \infty} \|\mathbf{G}^r(m, n)\|^{1/(m+r(n-m))} \quad (3.40)$$

Da  $\lambda_1(\mathbf{G}(m, n))$  er den største egen værdi, kan vi bruge ligning 3.29 til at vise at

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \|\mathbf{G}^r(m, n)\| = (\lambda_1(\mathbf{G}(m, n)))^r \quad (3.41)$$

Vi får derfor

$$\mu \leq \lim_{r \rightarrow \infty} ((\lambda_1(\mathbf{G}(m, n)))^r)^{1/(m+r(n-m))} = \lim_{r \rightarrow \infty} (\lambda_1(\mathbf{G}(m, n)))^{1/(m/r+(n-m))} \quad (3.42)$$

så

$$\mu \leq (\lambda_1 \mathbf{G}(m, n))^{1/(n-m)} \quad (3.43)$$

og sætningen er hermed bevist.  $\square$

Sætningen betyder, at vi kan opstille en øvre grænse for  $\mu$  ved at finde den maksimale egen værdi for  $\mathbf{G}(m, n)$ .

### 3.3.2 Metoden i praksis

Alm skriver, at numeriske beregninger tyder på, at  $\lambda_1(\mathbf{G}(m, n))$  er en aftagende funktion af  $m$  og  $n$ , men beviser ikke denne påstand. Hvis gisningen er rigtig, betyder det, at vi skal vælge nogle store værdier af  $m$  og  $n$ . Problemet er at  $\mathbf{G}(m, n)$  er en  $c_m \times c_m$ -matrix, så antallet af elementer vokser kraftigt med  $m$ . Alm har beregnet  $c_m$  for  $m$  op til 34 for bikubegitteret, se tabel 3.1.

Dette betyder, at man skal finde den maksimale egen værdi for en temmelig stor matrix, hvilket er lidet tiltrækkende. Ved at udnytte gitterets regularitet, kan man imidlertid reducere matrixens orden. To  $m$ -skridt selvundvigende vandring opfattes som ækvivalente, hvis den ene kan afbildes over i den anden ved en symmetrioperation. Denne opdeling af de selvundvigende vandring, bruges til at definere en ny matrix,

$$\tilde{\mathbf{G}}(m, n) = \tilde{g}_{rs}(m, n) \quad (3.44)$$

Alm viser at den maksimale egen værdi for  $\mathbf{G}(m, n)$  er den samme som for  $\tilde{\mathbf{G}}(m, n)$ , og da der højst er  $c_m$  forskellige ækvivalensklasser, og der for de

$m$	$c_m$
1	3
2	6
3	12
4	24
5	58
6	90
7	174
8	336
9	1218
⋮	
34	4531816950

**Tabel 3.1** Beregninger af  $c_m$  for bikubegitteret.

fleste gitre vil være langt færre, opnår Alm en beregningsmæssig besparelse af karat.

Alm har beregnet en øvre grænse for  $\mu$  for bikubegitteret (på en 80286-8 computer!) ved at bruge værdierne  $n = 34$ ,  $m = 12$ , og fandt

$$\mu < 1,87603. \quad (3.45)$$

Både denne værdi og Fisher og Sykes' værdi afhænger kraftigt af de computerressourcer, som de har til rådighed. Det er derfor sikkert at der eksisterer bedre værdier, end dem vi har fundet. Der er dog ingen resultater, som afviser Nienhuis' værdi for bikubegitterets forbindelseskonstant.

## 4 Introduktion til den statistisk mekaniske metode – og de anvendte modeller

Fysikeren B. Nienhuis gav i en artikel fra 1982 argumenter for, at bikubegitterets forbindelseskonstant har værdien  $\mu = \sqrt{2 + \sqrt{2}}$ . Disse argumenter bygger på fysiske teorier, og adskiller sig derved fra andre forsøg på at bestemme værdien af forbindelseskonstanten. I 1987 beskrev han metoden mere udførligt, men stadig fra et fysisk synspunkt, snarere end et matematisk. Vi har derfor gjort argumentationen mere fuldstændig og stringent fra et matematisk synspunkt, men har været nødsaget til at udelade nogle af detaljerne.

Nienhuis opstiller en statistisk mekanisk model, løkkemodellen, hvis såkaldte kritiske punkt er lig med den reciprokke værdi af forbindelseskonstanten. For at bestemme det kritiske punkt foretager Nienhuis en sand *tour de force* af transformationer mellem forskellige statistisk mekaniske modeller.

Metoden bygger således på den fysiske disciplin statistisk mekanik, som vi indledningsvis giver en kort beskrivelse af de overordnede principper bag, hvilket inkluderer et afsnit om kritiske fænomener og punkter. Efter dette kommer et afsnit med nogle grundlæggende begreber, som skal anvendes i transformationskæden. Til sidst er der en kort introduktion til de modeller som benyttes. I næste kapitel vil vi så beskrive transformationskæden for derved at fastsætte værdien af bikubegitterets forbindelseskonstant.

### 4.1 De grundlæggende principper i statistisk mekanik

*[Statistisk mekanik] forsøger at forudsige og beskrive de målelige egenskaber af makroskopiske systemer på baggrund af egenskaberne og opførslen af systemets mikroskopiske konstituent. . . . Statistisk mekanik trækker på sandsynlighedsregning, så den koncentrerer sig ikke om opførslen af hver enkel af de individuelle partikler, men om den gennemsnitlige opførsel af et stort antal ens partikler. [Frit oversat fra Encyclopedia Britannica]*

Mere konkret forestiller vi os et fysisk system med en given temperatur  $T$ , som består af en mængde partikler. Vi indskrænker os til det specialtilfælde hvor partiklerne sidder i gitterpunkterne på et gitter. Hver enkelt partikel kan befinde sig i forskellige tilstande, og  $\Omega_v$  betegner mængden af forskellige

tilstande, som partiklen i et gitterpunkt  $v$  kan være i. Elementerne i  $\Omega_v$  kan være reelle tal, eller  $n$ -dimensionale vektorer, der angiver *spinnet* (et udtryk for partiklens magnetisering). I de fleste tilfælde er  $\Omega_v$  den samme mængde i alle gitterpunkter. Hele systemets tilstand er specificeret når hver enkelt partikels tilstand er angivet; mængden af systemets tilstande giver vi symbolet  $\Omega$ .

Udover at angive partiklernes mulige tilstande skal man angive en funktion

$$\mathcal{H} : \Omega \mapsto \mathbf{R} \quad (4.1)$$

Denne funktion kaldes systemets *Hamiltonfunktion*, og den beskriver energien af en systemtilstand. En statistisk mekanisk model består i en specifikation af systemets tilstande og Hamiltonfunktion. Har vi angivet disse to, følger resten i princippet af formalismen.

Sandsynligheden for at et system befinder sig i en tilstand  $\omega \in \Omega$  er defineret ved

$$p(\omega) = Z^{-1} \exp(-\mathcal{H}(\omega)/k_b T) \quad (4.2)$$

hvor  $k_b$  er Boltzmanns konstant, og  $Z$  er en normaliseringskonstant, kaldet tilstandssummen. Den eksponentielle faktor  $\exp(-\mathcal{H}(\omega)/k_b T)$  kaldes for Boltzmannsfaktoren.

Hvis energitilstandene er diskrete, findes normaliseringskonstanten  $Z$  ved at summere Boltzmannsfaktorerne over alle systemets tilstande

$$Z = \sum_{\omega \in \Omega} \exp(-\mathcal{H}(\omega)/k_b T) \quad (4.3)$$

Dette betyder at sandsynligheden er 1 for at systemet er i én eller anden tilstand. Fordi der summeres over tilstande, kaldes  $Z$  for tilstandssummen. I det kontinuerte tilfælde skal summen erstattes af et integral.

Ud fra denne sandsynlighedsfordeling defineres middelværdien af en funktion  $f$  på sædvanlig sandsynlighedsteoretisk vis. Vi følger fysikerne og betegner middelværdien med  $\langle f \rangle$ . Hvis systemets energier er diskrete, er denne middelværdi givet ved

$$\langle f \rangle = Z^{-1} \sum_{\omega \in \Omega} f(\omega) \exp(-\mathcal{H}(\omega)/k_b T) \quad (4.4)$$

Denne form for middelværdi kaldes til tider for *termisk midling*. Dette er grundprincipperne i den statistisk mekaniske formalisme og det ses at man kan formulere den matematisk.

Fysikerne er interesserede i at kunne beregne makroskopiske størrelser vha. formalismen; og de definerer derfor Helmholtz fri energi for systemet, dvs. den energi som kan anvendes til arbejde, ud fra tilstandssummen

$$A = -k_b T \ln Z \quad (4.5)$$

Ved at differentiere den fri energi med hensyn til forskellige parametre, kan man finde systemets termodynamiske egenskaber, dvs. bestemme værdier for alle interessante makroskopiske parametre, såsom varmekapacitet, magnetisering, tryk, entropi osv. På denne måde giver kendskab til tilstandssummen mulighed for at bestemme alle makroskopiske størrelser.

Har vi f.eks. et system som befinder sig i et magnetfelt  $H$ , og energitilstandene afhænger af størrelsen af  $H$ , er systemets magnetisering ved fastholdt temperatur defineret ved

$$M = - \left( \frac{\partial A}{\partial H} \right)_T \quad (4.6)$$

Fodtegnet  $T$  betyder, at det er magnetiseringen ved fastholdt temperatur, men vi vil ikke beskrive nærmere, hvordan dette matematisk skal opfattes.

Hvis man differentierer magnetiseringen med hensyn til det magnetiske felt, får man den såkaldte *isoterme magnetiske susceptibilitet* (eller bare susceptibilitet)

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T \quad (4.7)$$

som spiller en vigtig rolle indenfor teorien for *kritiske fænomener* (se afsnit 4.1.1).

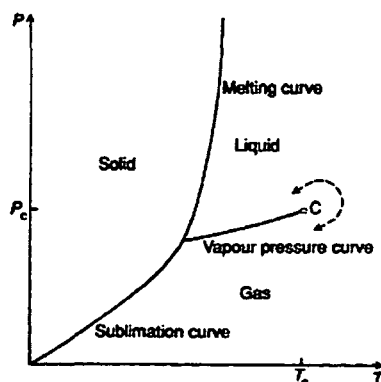
Da tilstandssummen, som funktion, er tilstrækkelig til at bestemme alle makroskopiske egenskaber for et system, er systemer, som har samme tilstandssum, derfor identiske fra et makroskopisk synspunkt. Dette skal vi se er helt grundlæggende for transformationerne mellem de statistisk mekaniske modeller.

#### 4.1.1 Kritiske fænomener

Inden for fysikken har man observeret nogle fænomener som ikke umiddelbart virker beslægtede, men som det ikke desto mindre er lykkedes at opstille en forenende teori for. Disse fænomener kaldes kritiske fænomener, hvilket beskriver at der sker kvalitativ ændring. Et eksempel på et kritisk fænomen er faseovergangen fra væske til gas. Tegner man et diagram for tryk og temperatur for f.eks. almindeligt vand, er der områder, hvor vandet er på hhv. fast-, væske- og gasform (se figur 4.1). Disse områder er adskilt af linier, hvor to faser kan eksisterer samtidig, men er klart skelnelige.

Ekspirer viser, at der er en værdi af trykket og temperaturen på kurven mellem væske- og dampform, hvor der sker en kvalitativ ændring: Er trykket og temperaturen højere end denne værdi kan man ikke længere skelne de to faser fra hinanden, og vandet er blevet til vanddamp med en høj tæthed. Punktet, hvor denne ændring indtræder, kaldes for et kritisk punkt [Wilson, K.G., 1979].

Et andet klassisk eksempel på et kritisk fænomen er ferromagneter, eller permanente magneter, som findes i naturen. Disse har et kritisk punkt, kaldet



Figur 4.1 ( $P, T$ ) diagram for et stof [Yeomans, J.M., 1992].

Curie-punktet eller Curie-temperaturen, som for jern er  $1044\text{K}$ . Ved temperaturer over denne temperatur er stoffet ikke magnetisk. Afkøler man stoffet fortsætter det med at være umagnetisk indtil Curie-temperaturen nås, hvor stoffet bliver magnetiseret. Sænkes temperaturen yderligere ændres magnetiseringen kontinuert [Wilson, K.G., 1979].

Der findes en mængde af sådanne kritiske fænomener, men de to ovenstående eksempler giver et indtryk af deres karakteristika, så vi vil ikke komme med yderligere eksempler. Eksperimenter viser at der ved temperaturer omkring det kritiske punkt sker ting og sager. Når temperaturen for væskesystemet går mod den kritiske værdi (og trykket fastholdes på den kritiske værdi), divergerer varmekapaciteten for vandet og er uendelig i det kritiske punkt. Susceptibiliteten for ferromagneter udviser en tilsvarende opførsel når temperaturen nærmer sig Curie-temperaturen og er uendelig når systemet har denne temperatur. Det, vi skal bruge senere er, at en størrelse, i vores tilfælde susceptibiliteten, divergerer.

### Ising-modellen

Et af de vigtigste og simpleste eksempler på en fysisk model med denne type egenskaber, er *Ising-modellen*. Ising-modellen består grundlæggende af et gitter hvor der er placeret en partikel i hvert gitterpunkt. Hver partikel befinder sig i én af to tilstande,  $+1$  eller  $-1$ . Tilstanden kaldes for partiklens *spin*, og angiver partiklens magnetiske moment. Spinnet opfattes som en vektor, dvs. det peger enten op eller ned, kaldet henholdsvis spin-op og spin-ned.

En partikel vekselvirker med sine nærmeste naboer og energien af en partikels spin afhænger således både af spinnets værdi og de omkring liggende partiklers spinværdier. Spinnene vekselvirker svarende til at en magnet vekselvirker med en anden magnet. Vekselvirkningen mellem to spin har forskellig energi afhængig af om spinnene er parallelle eller antiparallelle. Derudover kan systemet placeres i et ydre magnetfelt, som også vekselvir-

ker med spinnene og har forskellig energi for forskellige spinretninger. Hele systemet antager forskellige energier, alt efter konfigurationen af spinnene.

Ising-modellen er løst eksakt i en og to dimensioner og spiller derfor en vigtig rolle inden for studiet af kritiske fænomener. Ising-modellen benyttes til at modellere magnetiske materialer, og kan f.eks. reproducere den kritiske opførsel af ferromagneter.

### 4.1.2 Spin-modeller

Ising-modellen tilhører en generel klasse af modeller, kaldet *spin-modeller*. Disse modeller defineres ved at placere partikler i alle gitterpunkter og associere en  $n$ -dimensional vektor  $\mathbf{S}$  til partiklerne.  $\Omega_v$  består således af  $n$ -dimensionale vektorer, og en vektor i  $\Omega_v$  kaldes en spintilstand. Systemets tilstand  $\omega \in \Omega$  specificeres ved at angive alle partiklernes spintilstand, hvorved man får en spinkonfiguration. Det antages, at vektorerne i  $\Omega_v$  har konstant længde  $\sqrt{n}$ , dvs. at der for alle  $v$  gælder

$$\mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v) = n \quad (4.8)$$

For at definere modellen skal Hamiltonfunktionen som funktion af  $\omega \in \Omega$  angives. I de fleste tilfælde er det kun spin i gitterpunkter som er nærmeste naboer som vekselvirker, men der eksisterer også modeller, hvor længere rækkende vekselvirkninger medtages. Alle spinmodellerne har de samme systemtilstande (bortset fra længden af spinnene), men Hamiltonfunktionen varierer fra model til model.

Er Hamiltonfunktionen angivet, kan vi finde energien af systemets spinkonfigurationer, og udregne tilstandssummen ved termisk midling (ligning 4.3). I stedet for at gå til første principper, er det ofte bekvemt at beregne tilstandssummen direkte fra spinkonfigurationen. Til den ende defineres *vinkelmiddelværdien*<sup>1</sup> som vi betegner med  $\langle \dots \rangle_A$ . Vi definerer ligefordelingsmålet, som et andet sandsynlighedsmål på  $\Omega$ , der opfylder

For ethvert gitterpunkt  $v$  gælder, at alle spintilstande i  $\Omega_v$  er lige sandsynlige, dvs. alle spinorienteringer tildeles samme sandsynlighed.

For alle  $v_1, v_2$ , som er forskellige, er sandsynligheden for, at partiklen i  $v_1$  er i spintilstand  $\omega_{v_1} \in \Omega_{v_1}$  uafhængig af sandsynligheden for, at  $v_2$  er i tilstand  $\omega_{v_2} \in \Omega_{v_2}$ .

Ud fra denne sandsynlighedsfordeling defineres vinkelmiddelværdien af en funktion, idet vi kender sandsynligheden for forskellige spinkonfigurationer.

Det statistiske mekaniske sandsynlighedsmål beskrevet i afsnit 4.1 opfylder i det generelle tilfælde ikke de to ovenstående betingelser, og de to sandsynlighedsmål afviger derfor fra hinanden. Det korrekte sandsynlighedsmål i

<sup>1</sup>Der er ikke konsensus om denne betegnelse; [Sarma, G., 1975] kalder den f.eks. for den geometriske middelværdi.

statistisk mekanik er givet i ligning 4.2, og for at komme fra ligefordelingsmålet til det statistisk mekaniske sandsynlighedsmål, skal vi multiplicere med Boltzmannsfaktoren.

Vinkelmiddelværdien af en funktion  $f(\omega)$ ,  $\omega \in \Omega$  er således identitisk med den termiske midling af  $f$ , hvis vi erstatter  $f(\omega)$  med  $f(\omega) \exp(-\mathcal{H}(\omega)/k_b T)$

$$\langle f \rangle = \langle f(\omega) \exp(-\mathcal{H}(\omega)/k_b T) \rangle_A \quad (4.9)$$

Tilstandssummen kan derfor trivielt omdefineres ved at multiplicere med en konstant til

$$Z = \langle \exp -\mathcal{H}(\omega)/k_b T \rangle_A \quad (4.10)$$

En af grundene til at definere vinkelmiddelværdi er at det er muligt at vise et lemma, *løkke- og kædelemmaet*, som forsimples analysen en del. Lemmaet bygger på følgende observation.

Lad  $S_i(v)$  være den  $i$ 'te komponent af en spinvektor,  $S_i(v) : \Omega \mapsto \mathbf{R}$ . Da gælder at vinkelmiddelværdien af produktet af spinkomponenterne i et gitterpunkt  $v$ , er givet ved

$$\langle S_j(v) S_k(v) \rangle_A = \begin{cases} 1 & \text{for } j = k \\ 0 & \text{for } j \neq k \end{cases} \quad (4.11)$$

Dette ses af symmetri Grunde for  $j \neq k$ , fordi vi midler over to uafhængige komponenter, så

$$\langle S_j(v) S_k(v) \rangle_A = \langle S_j(v) \rangle_A \langle S_k(v) \rangle_A \quad (4.12)$$

Middelværdien af disse er nul, så middelværdien af produktet er nul. Når  $j = k$  gælder der ligeledes af symmetri Grunde at

$$\langle S_j(v)^2 \rangle_A = n^{-1} \langle \mathbf{S}(v)^2 \rangle_A = 1 \quad (4.13)$$

idet vi tidligere definerede længden af spinvektorerne til  $\sqrt{n}$ .

#### Lemma 4.1 (løkke- og kædelemma)

Lad  $\mathbf{S}(v_i)$  være en  $n$ -dimensional vektor med længden  $\sqrt{n}$  i gitterpunktet  $v_i$  og  $S_1(v_i)$  denne vektors første komponent. For en selvundvigende polygon på et gitter, svarende til en følge af punkter,  $v_0, v_1, v_2, \dots, v_m$ , gælder at

$$\langle \mathbf{S}(v_1) \cdot \mathbf{S}(v_2) \mathbf{S}(v_2) \cdot \mathbf{S}(v_3) \mathbf{S}(v_3) \cdots \mathbf{S}(v_m) \mathbf{S}(v_m) \cdot \mathbf{S}(v_1) \rangle_A = n \quad (4.14)$$

Hvis  $v_1, v_2, \dots, v_m$  er en selvundvigende vandring, gælder at

$$\langle S_1(v_1) \mathbf{S}(v_1) \cdot \mathbf{S}(v_2) \mathbf{S}(v_2) \cdot \mathbf{S}(v_3) \mathbf{S}(v_3) \cdots \cdots \mathbf{S}(v_{m-1}) \mathbf{S}(v_{m-1}) \cdot \mathbf{S}(v_m) S_1(v_m) \rangle_A = 1 \quad (4.15)$$



**Bevis for løkke- og kædelemmaet**

Det første man skal overbevise sig om, er at ligning 4.14, kan skrives på matrixform. Højresiden af ligningen består af led af typen

$$\mathbf{S}(v_1) \cdot \mathbf{S}(v_2)\mathbf{S}(v_2) \cdot \mathbf{S}(v_3) \quad (4.16)$$

Det midterste led kan omskrives til en matrix, som dannes ved at tage det ydre produkt af  $\mathbf{S}(v_2)$  med sig selv, dvs. det  $(i, j)$ 'te matrixelement er produktet af  $S_i$  og  $S_j$ . Dette indses ved at skrive de to indre produkter op, som optræder i ligning 4.16 og sammenligne med matrixudtrykket. Ud fra ligning 4.11 får vi, at vinkelmiddelværdien af ydre-produktmatricen  $\mathbf{S}(v)\mathbf{S}(v)$  er givet ved enhedsmatricen  $\mathbf{I}$ . For en selvundvigende polygon på gitret, svarende til en følge af gitterpunkter  $v_1, v_2, \dots, v_m$ , hvor  $v_1$  og  $v_m$  er forbundne, er alle gitterpunkterne forskellige, fordi de er punkter i en selvundvigende polygon. De er derfor uafhængige, når man tager vinkelmiddelværdien, så

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{S}(v_1) \cdot \mathbf{S}(v_2)\mathbf{S}(v_2) \cdot \mathbf{S}(v_3)\mathbf{S}(v_3) \cdots \mathbf{S}(v_m)\mathbf{S}(v_m) \cdot \mathbf{S}(v_1) \rangle_A \\ &= \langle \mathbf{S}(v_1) \cdot \langle \mathbf{S}(v_2)\mathbf{S}(v_2) \rangle_A \cdot \langle \mathbf{S}(v_3)\mathbf{S}(v_3) \rangle_A \cdots \langle \mathbf{S}(v_m)\mathbf{S}(v_m) \rangle_A \cdot \mathbf{S}(v_1) \rangle_A \\ &= \langle \mathbf{S}(v_1) \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} \cdots \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}(v_1) \rangle_A \\ &= \langle \mathbf{S}(v_1) \cdot \mathbf{S}(v_1) \rangle_A = n \end{aligned}$$

Den anden del af lemmaet vises på tilsvarende måde.  $\square$

Dette lemma kan således vises stringent, men vi skal bruge en generalisering til vektorer som har ikke-heltallig dimension, *Sarmas kvasi-lemma*<sup>2</sup>. Lemmaet kan vises ud fra følgende gisning, som ikke kan vises stringent, så lemmaet er ligeledes ikke stringent. Vi følger her Hughes og Sarma, [Hughes, H.D., 1995, Sarma, G., 1975], men i modsætning til dem, deler vi lemmaet op i to; en gisning og selve lemmaet.

**Sarmas gisning**

Identiteten 4.11 holder ligeledes for ikke heltallige positive  $n$ , idet mindste i den formelle grænse  $n \rightarrow 0$ .  $\square$

Der er ikke noget bevis for, at denne identitet holder i grænsen  $n \rightarrow 0$ , fordi man ikke ved, hvad man skal forstå ved grænseværdien af  $n$  for ikke-heltallige værdier.

**Lemma 4.2 (Sarmas kvasi-lemma)**

*I grænsen  $n$  gående mod nul gælder for ethvert gitterpunkt at vinkelmiddelværdien af en spinkomponent eller et produkt af tre eller flere spinkomponenter, er nul.*

<sup>2</sup>Sarmas bevis findes som et appendiks til en artikel, og er baseret på nogle upublicerede noter af Sarma. Derfor er lemmaet opkaldt efter Sarma.

**Bevis**

Vi undersøger følgende funktion

$$\phi = \left\langle \exp \left( i \sum_{j=1}^n k_j S_j(s) \right) \right\rangle_A = \langle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{S}) \rangle_A \quad (4.17)$$

Ved at rækkeudvikle eksponentialfunktionen og benytte at vinkelmiddelværdien er additiv, kan vi omskrive  $\phi$  til

$$\phi = 1 + i \sum_{i=1}^n k_i \langle S_i(s) \rangle_A - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n k_i k_j \langle S_i(s) S_j(s) \rangle_A + \dots \quad (4.18)$$

Af symmetri Grunde går de led, som indeholder et ulige antal spinkomponenter ud ved midling, og  $\phi$  afhænger derfor kun af

$$|\mathbf{k}| = k = \left( \sum_{j=1}^n k_j^2 \right)^{1/2} \quad (4.19)$$

og vi kan skrive  $\phi = \phi(k)$ . Ved at differentiere ligning 4.17 to gange med hensyn til hver af  $k_i$ 'erne og opfatte dem som parametre, fås

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial k_1^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial k_2^2} + \dots + \frac{\partial^2 \phi}{\partial k_n^2} = - \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{S}) \rangle_A \quad (4.20)$$

Hvis vi bruger, at  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} = n$ , er højre side i ligning 4.20 simpelthen  $-n\phi$ . Kædereglene giver at

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial k_i^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} \left( \frac{\partial k}{\partial k_i} \right)^2 + \frac{\partial \phi}{\partial k} \frac{\partial^2 k}{\partial k_i^2} \quad (4.21)$$

For alle  $i$  gælder der at

$$\frac{\partial k}{\partial k_i} = \frac{k_i}{k} \quad (4.22)$$

og

$$\frac{\partial^2 k}{\partial k_i^2} = \frac{1}{k} \left( 1 - \frac{k_i^2}{k^2} \right) \quad (4.23)$$

Differentialligningen i 4.20 kan derfor omskrives til

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} + \frac{n-1}{k} \frac{\partial \phi}{\partial k} = -n\phi \quad (4.24)$$

Bruger vi ligning 4.11 på det kvadratiske led i ligning 4.18, forsvinder de led i summen, hvor  $i$  og  $j$  er forskellige. Det kvadratiske led ender derfor med at være  $-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n k_j^2 = -\frac{1}{2} k^2$ . De resterende led i summen indeholder en højere

potens af  $k$ , så når vi differentierer ligning 4.18 med hensyn til  $k$  to gange, og lader  $k$  gå mod nul, får vi følgende grænsebetingelse

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} = -1 \text{ for } k = 0 \quad (4.25)$$

Ved at indsætte  $k = 0$  i definitionen af  $\phi$ , opnår vi en anden grænsebetingelse

$$\phi(0) = 1 \quad (4.26)$$

I grænsen  $n \rightarrow 0$  kan differentiallyigningen i ligning 4.24 omskrives til

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} - \frac{1}{k} \frac{\partial \phi}{\partial k} = 0 \quad (4.27)$$

$k^2$  og 1 er løsninger til denne ligning, så den generelle løsning er en linearkombination af disse to. Følgende funktion

$$\phi = 1 - \frac{1}{2}k^2 \quad (4.28)$$

er en løsning til 4.27, som desuden opfylder grænsebetingelserne i ligning 4.25 og 4.26 og vi konkluderer derfor, at dette er løsningen.

Funktionen  $\phi$  givet ved ligning 4.28 er lig med det første og det tredje led i rækken i ligning 4.18, så de resterende led i denne række er nul. Disse led indeholder middelværdier af produkter af tre eller flere spin-komponenter, og hvis de skal være nul, må vinkelmiddelværdien af disse produkter være nul. Udfra Sarmas gisning har vi derfor vist Sarmas kvasi-lemma.  $\square$

## 4.2 De anvendte statistisk mekaniske modeller

Nienhuis viser at en bestemt model, løkke-modellen på et bikubegitteret, har det samme kritiske punkt som en såkaldt Potts-model på et trekantsgitter. Dette gør han ved en transformation mellem følgende fire statistisk mekaniske modeller

1. En løkke-model på bikubegitteret;
2. En SOS-model på bikubegitteret;
3. En 6V-model på kagomé-gitteret; og
4. En Potts-model på trekantsgitteret.

I en transformation af en model omskriver man dens tilstandssum ved at ændre enten summanden eller summationsdomænet. Den første ændring kan f.eks. være, at man i stedet for spin tildeler regioner passende værdier. I det andet tilfælde kan man summere over diagrammer i stedet for gitterpunkter.

To modeller opfattes som ækvivalente, hvis der findes en transformation fra den ene til den anden og det kan vises at deres tilstandssum er den samme funktion, dvs. de indeholder de samme led.

For at skabe et overblik i transformationskæden, har vi valgt at adskille definitionen og beskrivelsen af modellerne fra selve transformationen mellem dem. Vi starter derfor med at definere nogle modeller, så læseren må væbne sig med lidt tålmodighed hvad angår anvendelsen af disse modeller. Definitionen af modellerne afhænger ikke af et specifikt gitter, men for den konkrete værdi af tilstandssummen spiller gitteret en rolle.

#### 4.2.1 Nienhuis' løkkemodell

Nienhuis opstiller en model på bikubegitteret som tilhører den generelle klasse af spin-modeller. Nienhuis' model kaldes sædvanligvis for *Nienhuis' løkkemodell* og er defineret ved følgende Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = -k_b T \log \left( \prod_{\langle vv' \rangle} (1 + x \mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v')) \right) \quad (4.29)$$

hvor  $x$  er en parameter, som tildeles en fast værdi. Symbolet  $\langle vv' \rangle$  betegner at produktet er over par af gitterpunkter  $v$  og  $v'$  som er nærmeste naboer på et endelig stykke af bikubegitteret. Løkkemodellens tilstandssum er derfor

$$Z_{\text{løkke}} = \left\langle \prod_{\langle vv' \rangle} (1 + x \mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v')) \right\rangle_A \quad (4.30)$$

Produktet kan skrives ud, hvilket giver potenser af  $x$ , hvis koefficienter består af led, som er produkter af spinvektorer. Produktet er således en potensrække, som er endelig fordi der kun er et endeligt antal nærmeste naboer i gitteret. Tilstandssummen kan derfor skrives

$$Z_{\text{løkke}} = \left\langle \sum_k a_k x^k \right\rangle_A \quad (4.31)$$

Koefficienten  $a_k$  for det  $k$ 'te led i potensrækken er en sum over permutationer af  $k$  nærmeste naboer. Summanden er led af typen

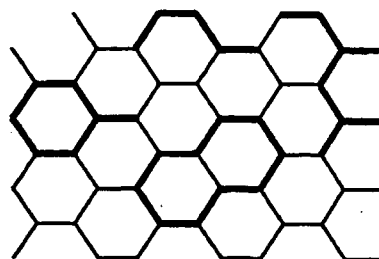
$$\prod_{\langle vv' \rangle} (\mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v')) \quad (4.32)$$

hvor  $v$  og  $v'$  er nærmeste naboer, og produktet løber over en given permutation af  $k$  par af nærmeste naboer i gitteret.

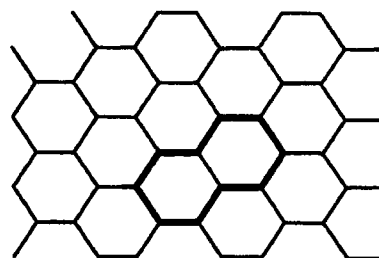
Hvert led i produktet i tilstandssummen kan repræsenteres som et diagram på gitteret på følgende måde. Et led indeholder en faktor for hvert

par af gitterpunkter, som er nærmeste naboer. Faktoren for båndet mellem  $(v, v')$  er enten 1 eller  $x\mathbf{S}(v_i) \cdot \mathbf{S}(v')$ . I det første tilfælde skal båndet mellem de to gitterpunkter forblive tomt, mens der placeres en væg på båndet i det andet tilfælde.

Et gitterpunkt kan optræde et ulige antal gange i produktet i ligning 4.32. Er dette tilfældet vil det pågældende led gå ud når vinkelmiddelværdien tages, fordi spinretninger, som er stik modsatte, har modsat fortegn og således ophæver hinanden ved midlingen. Optræder et gitterpunkt et lige antal gange, er fortegnet af produktet altid ikke-negativt og leddet forsvinder derfor ikke, når der midles. Koefficienterne  $a_k$  vil således bestå af en sum af led svarende til en delmængde af båndene, hvor et lige antal bånd mødes i ethvert punkt. Er koordinationstallet tre, som for bikubegitteret, skal to bånd derfor mødes i hvert punkt. En situation før og efter midling er vist på figur 4.2 og 4.3.



Figur 4.2 Et diagram svarende til et typisk led i ligning 4.32.



Figur 4.3 Diagrammet på figur 4.2 efter midling.

Fortolkes dette i form af diagrammer på bikubegitteret betyder det, at de eneste bidrag til koefficienten er selvundvigende polygoner. Koefficienten til den  $k$ 'te potens vil kun indeholde led, hvor der indgår  $k$  nærmeste naboer, så disse polygoner har en samlet længde  $k$ . Ved at bruge løkke- og kædelemmæet, når man frem til at vinkelmiddelværdien af hver af disse polygoner bidrager med  $n$ .

Koefficienten  $a_k$  i ligning 4.31 består af selvundvigende polygoner (som er indbyrdes disjunkte) og diagrammer som ikke er sådanne polygoner. De sidste diagrammer vil gå ud ved midling, mens hver af de første bidrager med  $n$  til den samlede tilstandssum. Hvis  $\Lambda$  er antallet af disjunkte selvundvigende polygoner til koefficienten  $a_k$ , er denne koefficient givet ved  $n^\Lambda$  og tilstandssummen kan skrives

$$Z_{\text{løkke}} = \sum_{\mathcal{D}} x^L n^\Lambda \quad (4.33)$$

Der summeres over alle diagrammer  $\mathcal{D}$ , som består af selvundvigende polygoner.  $\Lambda$  er antallet af sådanne polygoner, som diagrammet  $\mathcal{D}$  består af, mens  $L$  betegner det totale antal vægge.

Denne udledning bygger på løkke- og kædelemmaet, så i grænsen hvor  $n$  går mod nul, er vi nødt til at antage at Sarmas gisning er korrekt. Antager vi at dette er tilfældet, får vi at  $Z_{l\ddot{o}kke}$  går mod 1, når  $n$  går mod 0.

#### 4.2.2 SOS-model

For at definere en *Solid-On-Solid* model (*SOS*-model) tildeles hver flade (dvs. områder, som afgrænses af gitterets bånd) i gitteret en heltallig værdi, som kaldes en højde. En flades højde må maksimalt afvige 1 fra de omkringliggende flader. Antag at der er  $j$  tilladte højdekonfigurationer omkring et gitterpunkt. Disse tildeles en energi,  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_j$ , og modellens Hamiltonfunktion er defineret ved summen af alle gitterpunkters energi

$$\mathcal{H} = n_1\varepsilon_1 + \dots + n_j\varepsilon_j \quad (4.34)$$

hvor  $n_i$  angiver en tilstands antal af gitterpunkter med højder i den  $i$ 'te højdekonfiguration.

Defineres  $\omega_i$  som den  $i$ 'te højdekonfigurations Boltzmannsfaktor  $\omega_i = \exp(-\varepsilon_i/k_bT)$ , fås at *SOS*-modellens tilstandssum er

$$\begin{aligned} Z_{SOS} &= \sum_h \exp[-(n_1\varepsilon_1 + \dots + n_j\varepsilon_j)/k_bT] \\ &= \sum_h \prod_{i=1}^j \omega_i^{n_i} \end{aligned} \quad (4.35)$$

her skal der summeres over samtlige tilladte højdekonfigurationer  $h$  i det samlede system. Boltzmannsfaktoren  $\omega_i$  kaldes også for gitterpunkt  $i$ 's vægt. *SOS*-modellen er således en model med diskrete, ubegrænsede højdevariable og en Hamiltonfunktion som kun afhænger af højdevariationen omkring de enkelte gitterpunkter [Nienhuis, B., 1987].

#### 4.2.3 6V-model

En tredje model konstrueres ved at placere pile på alle bånd i et gitter, således at de peger enten ind mod et gitterpunkt eller væk fra det. I et gitter med koordinationsstal 4 giver dette 8 mulige pilekonfigurationer omkring hvert gitterpunkt (se figur 4.4). Dette definerer en 8V-model (V for *vertex*). Ved at bruge den såkaldte isregel, som defineres om lidt, kan man begrænse antallet af tilladte pilekonfigurationer og derved danne en 6V-model.



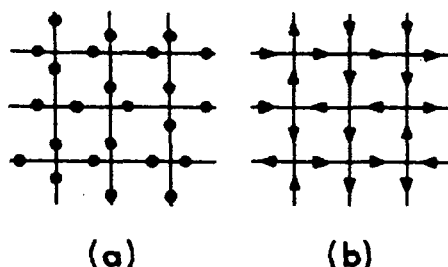
Figur 4.4 De otte forskellige pilekonfigurationer i en 8V-model. [Nienhuis, B., 1987]

### Istypemodeller

Den fysiske opførsel af is har givet navn til en bestemt type modeller, istypemodellerne. Bindingerne i is består af hydrogenbindinger, og oxygenatomerne danner derfor et gitter med koordinationstal 4, hvor der ligger en hydrogenion mellem hvert par af oxygenatomer, som er nærmeste naboer. Hydrogenionerne er på grund af en asymmetrisk ladningsfordeling fordelt omkring hvert oxygenatom således, at to af dem ligger tæt på oxygenatomet, og to af dem ligger langt fra oxygenatomet (se figur 4.5(a)). Figur 4.5(b) illustrerer, hvordan bindingerne i is kan overføres til pilekonfigurationer.

**Isregel:** Antallet af pilehoveder, som peger ind i et gitterpunkt, skal være det samme som antallet af pilehoveder, der peger ud af gitterpunktet.

Isreglen betyder at de to sidste af de 8 pilekonfigurationer i 8V-modellen på figur 4.4 ikke er tilladte, hvilket danner en 6V-model.



**Figur 4.5** Hydrogenbindinger på et kvadratisk gitter. a) Placeringen af ionerne på bindingerne, b) de tilsvarende pilekonfigurationer. [Baxter, R.J., 1982]

En 6V-model består således af 6 forskellige typer gitterpunkter, som er karakteriseret ved pilekonfigurationen omkring dem. Gitterpunkterne i 6V-modellen tildeles derefter en energi  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_6$ , som afhænger af pilekonfigurationen omkring gitterpunktet. 6V-modellens Hamiltonfunktion er defineret ved summen af alle gitterpunkters energi, svarende til SOS-modellens Hamiltonfunktion

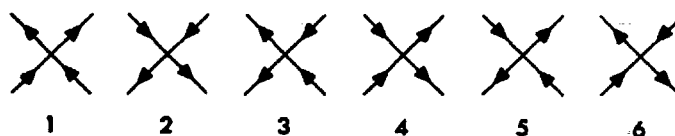
$$\mathcal{H} = n_1\varepsilon_1 + \dots + n_6\varepsilon_6 \quad (4.36)$$

hvor  $n_i$  angiver en tilstands antal af gitterpunkter med den  $i$ 'te pilekonfiguration.

Til de seks mulige pilekonfigurationer tildeler man energier som svarer til følgende Boltzmannfaktorer  $\omega_i = \exp(-\varepsilon_i/k_bT)$

$$\omega_1, \dots, \omega_6 = \tau, \tau, 1, 1, u + iv, u - iv. \quad (4.37)$$

hvor konfigurationerne er nummereret som på figur 4.6. Det kan umiddelbart give problemer at fortolke de imaginære vægte som sandsynligheder, men da vi ikke skal benytte os explicit af denne fortolkning, undlader vi at kommentere dette yderligere.



Figur 4.6 De tilladte pilekonfigurationer i en 6V-model.[Baxter, R.J., 1982]

6V-modellens tilstandssum er således

$$Z = \sum_p \exp [-(n_1 \varepsilon_1 + \dots + n_6 \varepsilon_6) / k_b T] \quad (4.38)$$

hvor  $n_i$  er antallet af gitterpunkter med pile i den  $i$ 'te pilekonfiguration, når systemet er i tilstanden  $p$ .

Ved at indsætte definitionen af  $\omega_i$  kan tilstandssummen udtrykkes ved pilekonfigurationernes vægte,  $\omega_1, \dots, \omega_6$

$$Z = \sum_p \prod_{i=1}^6 \omega_i^{n_i} \quad (4.39)$$

Der summeres over alle tilladte pilekonfigurationer. En 6V-model beskrives således som en model hvor der tildeles pile til hvert bånd i gitteret efter isreglen, og hvor Hamiltonfunktionen kun afhænger af pilekonfigurationen omkring de enkelte gitterpunkter.

#### 4.2.4 Potts-model

For at definere Potts-modellen, placeres en tilstandsvariabel,  $\sigma(v_i) = 1, 2, 3, \dots, q$ , i hvert gitterpunkt. Denne tilstandsvariabel kaldes for et spin. I Potts-modellen er vekselvirkningen mellem gitterpunkternes tilstande defineret ved følgende Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle vv' \rangle} \delta_{\sigma(v)\sigma(v')} \quad (4.40)$$

hvor der summeres over nærmeste naboer  $v$  og  $v'$ . Kroneckers  $\delta$  bevirker at energien af to nabo-spin er  $-J$ , hvis de er i samme  $\sigma$ -tilstand og nul ellers. Tilstandssummen bliver derfor

$$Z = \sum_s \exp \left( \frac{J}{k_b T} \sum_{\langle vv' \rangle} \delta_{\sigma(v)\sigma(v')} \right) \quad (4.41)$$

hvor der yderst summeres over systemets tilstande, og summationen i eksponentialfunktionen er over nærmeste nabopar på gitteret.



Ligning 4.41 kan omskrives til

$$Z = \sum_s \prod_{\langle vv' \rangle} \exp \left( \frac{J}{k_b T} \delta_{\sigma(v)\sigma(v')} \right) = \sum_s \prod_{\langle vv' \rangle} \left( \exp \left( \frac{J}{k_b T} \right) \right)^{\delta_{\sigma(v)\sigma(v')}} \quad (4.42)$$

Sættes  $w = \exp(J/kT) - 1$ , kan tilstandssummen skrives

$$Z = \sum_s \prod_{\langle vv' \rangle} (1 + w)^{\delta_{\sigma(v)\sigma(v')}} \quad (4.43)$$

Potts-modellen er kort sagt en model, hvor der placeres en (begrænset) heltallig tilstandsvariabel i hvert gitterpunkt. Hamiltonfunktionen for modellen afhænger kun af de nærmeste naboer, som er i samme tilstand.

## 5 Nienhuis' værdi for forbindelseskonstanten

Det kan umiddelbart være svært at se hvordan den fysiske teoribygning statistisk mekanik, kan bidrage til den selvundvigende vandring, som er et matematisk problem. Løkkemodellens susceptibilitet viser sig dog at være proportional med den selvundvigende vandrings frembringende funktion.

### 5.1 Løkkemodellen og den selvundvigende vandring

Løkkemodellens magnetiske susceptibilitet  $\chi_T$  kan findes ved passende differentiation af tilstandssummen, som det er angivet i afsnit 4.1 [Hughes, H.D., 1995]. Susceptibiliteten bestemmes med udgangspunkt i et bestemt gitterpunkt  $v_i$ , men gitterets regularitet betyder at den er uafhængig af det specifikke valg af gitterpunkt. Hughes når frem til

$$\chi_T(v_i) = \frac{q^2}{k_b T} \sum_{v_j} G(v_i, v_j) \quad (5.1)$$

Funktionen  $G(v_i, v_j) = \langle S_1(v_i) S_1(v_j) \rangle$  kaldes for *parkorrelationsfunktionen* mellem spinnene i gitterpunkterne  $v_i$  og  $v_j$ . Parkorrelationsfunktionen afhænger implicit af det specifikke system og dets parametre (såsom  $x$ ) via den termiske middelværdi. Den termiske middelværdi er i følge afsnit 4.1.2 ækvivalent med vinkelmiddelværdien, hvor argumentet er vægtet med det statistisk mekaniske sandsynlighedsmål, dvs.

$$G(v_i, v_j) = Z_{\text{løkke}}^{-1} \left\langle S_1(v_i) S_1(v_j) \prod_{\langle vv' \rangle} (1 + x \mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v')) \right\rangle_A \quad (5.2)$$

Svarende til omskrivningen af løkkemodellens tilstandssum, afsnit 4.2.1, kan produktanden skrives som en potensrække med hensyn til  $x$ , hvor koefficienten til den  $k$ 'te potens består af produkter af typen  $\mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v')$ . Et typisk led i ligning 5.2 er derfor givet ved

$$S_1(v_i) S_1(v_j) \prod_{\langle vv' \rangle} \mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v') \quad (5.3)$$

hvor produktet er over en følge af gitterpunkter,  $v_1, v'_1, v_2, v'_2 \dots v_k, v'_k$ , som opfylder at  $v_l, v'_l$  er nærmeste naboer.

Hvis et sådant led ikke skal forsvinde, når der midles over alle mulige spinretninger, er det af symmetri Grunde nødvendigt, at både  $v_i$  og  $v_j$  optræder i følgen  $v_1, v'_1, v_2, v'_2 \dots v_k, v'_k$ . Desuden er det nødvendigt at ethvert gitterpunkt i følgen (bortset fra  $v_i$  og  $v_j$ ) optræder præcis to gange, for i modsat fald vil hele leddet forsvinde ved midling. Ved en passende omnummerering når vi således frem til at et led, som ikke forsvinder, ser således ud

$$S_1(v_1)\mathbf{S}(v_1) \cdot \mathbf{S}(v_2)\mathbf{S}(v'_2) \cdots \mathbf{S}(v_k)\mathbf{S}(v'_k) \quad (5.4)$$

hvor  $v_1, v_2, \dots, v_k$  er en selvundvigende vandring og  $v_1 = v_i$  og  $v_k = v_j$ . Ved at benytte løkke- og kædelemmaet, når man frem til at vinkelmiddelværdien af et sådant led er 1. Koefficienten til den  $m$ 'te potens af  $x$  i rækkeudviklingen af parkorrelationsfunktionen består af samtlige selvundvigende vandringer fra gitterpunkt  $v_i$  til  $v_j$ , som hver bidrager med 1. Dette argument er analogt til argumenterne for omskrivningen af løkkemodellens tilstandssum i afsnit 4.2.1. Parkorrelationsfunktionen kan derfor alt i alt omskrives til at give

$$G(v_i, v_j) = Z_{l\theta kke}^{-1} \sum_{k=1}^{\infty} c_k(v_i, v_j) x^k \quad (5.5)$$

hvor  $c_k(v_i, v_j)$  angiver antallet af  $k$ -skridt selvundvigende vandringer fra gitterpunkt  $v_i$  til  $v_j$ . Her er det underforstået at gitterets størrelse er uendelig og vi antager at denne grænseovergang er uproblematisk.

For bikubegitteret har startpunktet ingen betydning for antallet af selvundvigende vandringer. Da enhver  $k$ -skridt selvundvigende vandring skal slutte et sted, er antallet af selvundvigende vandringer givet ved

$$c_k = \sum_{v_j} c_k(v_i, v_j) \quad (5.6)$$

Ved at summere  $G(v_i, v_j)$  over  $v_j$  og multiplicere med passende konstanter når vi frem til, at susceptibiliteten er givet ved

$$\chi_T = \frac{q^2}{k_b T} Z_{l\theta kke}^{-1} \sum_{k=1}^{\infty} c_k x^k \quad (5.7)$$

hvor  $c_k$  er antallet af  $k$ -skridt selvundvigende vandringer. For  $n \rightarrow 0$  er løkkemodellens tilstandssum uafhængig af  $x$ , og vi fandt i underafsnit 4.2.1 at  $Z_{l\theta kke} = 1$  i denne grænse. Dette udnytter vi til at bestemme susceptibiliteten, og den bliver derfor når  $n$  går mod nul

$$\chi_T = \frac{q^2}{k_b T} \sum_{k=1}^{\infty} c_k x^k \quad (5.8)$$

For  $n \rightarrow 0$  er  $\chi_T$  således proportional med den frembringende funktion for den selvundvigende vandring. Der er således en sammenhæng mellem løkkemodellen og den selvundvigende vandring på bikubegitteret. Ligning 5.8

fremkommer ved implicit brug af Sarmas kvasi-lemma, idet vi antager at omskrivningen af parkorrelationsfunktionen også er gyldig i grænsen  $n \rightarrow 0$ .

Som beskrevet i afsnit 4.1.1 om kritiske fænomener, divergerer susceptibiliteten i det kritiske punkt. Da konvergensradius adskiller de værdier af  $x$ , hvor susceptibiliteten konvergerer, fra de værdier, hvor den divergerer, er det naturligt at kalde  $x_c$  for det kritiske punkt for løkke-modellen. Hverken Hughes eller Nienhuis skriver eksplicit, hvordan de definerer det kritiske punkt for løkke-modellen, men vi opfatter det kritiske punkt som konvergensradius af ligning 5.8.

Af rodkriteriet og Hammersley-Mortons sætning fås at konvergensradius for denne række er givet ved

$$x_c = \left( \lim_{k \rightarrow \infty} c_k^{1/k} \right)^{-1} = \mu^{-1} \quad (5.9)$$

Hvis man kan bestemme den værdi af  $x$ , hvor løkke-modellen på et bikubegitter er kritisk, kan man således bestemme værdien af forbindelseskonstanten,  $\mu$ , som den reciproke værdi af  $x_c$ , det kritiske punkt.

### 5.1.1 Bestemmelse af det kritiske punkt

Et standardresultat indenfor fysikken fortæller os, at der eksisterer en transformation mellem Potts-modellen på trekantsgitteret og 6V-modellen på kagomé-gitteret hvor modellernes parametre bestemmes entydigt. Disse parameterværdier udgør et kritisk punkt for begge modeller. Dette resultat fremkommer ved brug af den fysiske teknik *renormalisering*<sup>1</sup>, og selvom det er ønskværdigt at have dette trin med i argumentationen, er denne teknik så avanceret, at det er et projekt i sig selv at beskrive og forstå den ordentligt. Vi kommer derfor ikke nærmere ind på disse argumenter, men udnytter blot resultatet.

Resultatet bruger vi til at bestemme løkkemodellens kritiske punkt. Først er det nødvendigt at vise, at løkkemodellen har samme egenskaber som 6V-modellen på kagomé-gitteret. Dette gør vi ved at transformere løkkemodellens tilstandssum til 6V-modellens tilstandssum, da de således udviser samme kritiske egenskaber. Det er også nødvendigt at bestemme 6V-modellens kritiske punkt ved at transformere tilstandssummen for Potts-modellen på trekantsgitteret til tilstandssummen for 6V-modellen på kagomé-gitteret. Gennem alle disse transformationer får vi fastsat en relation mellem alle parametre således at vi kan bestemme  $x_c$  som funktion af  $n$ .

## 5.2 SOS-model på bikubegitteret

Det første trin i transformationen af løkkemodellens tilstandssum går via SOS-modellen på bikubegitteret. Fladerne i bikubegitteret tildeles en hel-

<sup>1</sup>Denne teknik skal ikke forveksles med den matematiske teori af samme navn.

tallig højde  $M_i$  således at højderne for flader som støder op til hinanden ikke afviger med mere end 1, og der dannes herved en *SOS*-model. Tilstandssummen for *SOS*-modellen er givet ved

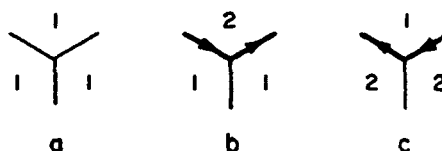
$$Z_{SOS} = \sum_h a^{n_a} b^{n_b} c^{n_c} \quad (5.10)$$

hvor  $a, b, c$  er vægte associeret til højdekonfigurationer og  $n_a, n_b, n_c$  er antallet gitterpunkter, hvis omkringliggende flader er i de forskellige højdekonfigurationer.

Et gitterpunkt i bikubegitteret er omgivet af tre flader med hver deres  $M_i$ , og gitterpunktets vægt tildeles efter disse højder. Er de alle tre ens, sættes vægten  $a$  til 1. Når én er større end de to andre, tildeles gitterpunktet vægten  $b = x \exp(i\alpha)$ , og gitterpunktet tildeles vægten  $c = x \exp(-i\alpha)$ , når én er mindre end de to andre. De tre vægte er altså

$$a, b, c = 1, x \exp(i\alpha), x \exp(-i\alpha) \quad (5.11)$$

Disse tre højdekonfigurationer og deres vægte er vist på figur 5.1.

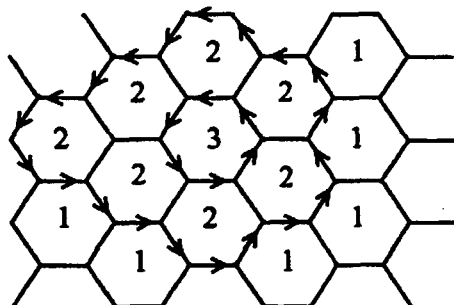


Figur 5.1 *SOS*-modellen på bikubegitteret. [Nienhuis, B., 1982]

I stedet for at summere over forskellige højdekonfigurationer i tilstandssummen, ønsker vi at transformere tilstandssummen således, at vi summerer over diagrammer på gitteret. En pil placeres på hvert bånd, som adskiller flader med forskellig højde, så det område med den største højde er på venstre side af pilens retning. Der placeres ingen pil, hvis fladerne har samme højde. Dette er illustreret på figur 5.1. Faktorerne  $\exp(i\alpha)$  og  $\exp(-i\alpha)$  er således associerede med venstre- og højresving af pilene. Der er en entydig korrespondance mellem højde- og pilekonfigurationer på gitteret, pga. kravene om at fladehøjderne skal være hele tal og at højdeforskellen mellem tilstødende områder maksimalt er 1.

En situation hvor der er tre pile på et gitterpunkts bånd, er i modstrid med princippet om at højdeforskellene ikke må overstige 1. Tilsvarende vil to pile aldrig gå ud fra eller ind i samme gitterpunkt. Dette betyder, at vi kan lave orienterede diagrammer, som følger pilene, og som har samme retning. Vi kan summere over alle tilladte pilekonfigurationer, ved at summere over orienterede diagrammer. Da pilene omkranser flader med forskellige højde, skal der kun summeres over diagrammer som består af orienterede løkker med samme retning. Da vi kun betragter et endeligt udsnit af bikubegitteret, er det ikke muligt at disse diagrammer indeholder lange strenge, men består

nødvendigvis af lukkede løkker (vi ser dog bort fra problemer ved gitterets rand). Et eksempel er vist på figur 5.2.



Figur 5.2 En højde- og en pilekonfiguration på bikubegitteret, og de tilsvarende orienterede diagrammer.

Omvendt giver et diagram, som består af sådanne orienterede løkker, anledning til en entydig pilekonfiguration og dermed en højdekonfiguration. På denne måde når vi frem til, at tilstandssummen er givet ved

$$Z_{SOS} = \sum_{OD} x^L \exp(i\alpha(l - r)) \quad (5.12)$$

hvor summationen er over alle orienterede diagrammer, som består af orienterede løkker på bikubegitteret med samlet længde  $L$  og et totalt antal venstresving på  $l$  og  $r$  højresving.

En løkke er en komponent, der omkranser et domæne på bikubegitteret, og foretager således præcis en fuld drejning. Hver løkke bidrager derfor med enten  $6$  eller  $-6$  til  $l - r$ . Hvis vi summerer over diagrammer i stedet for orienterede diagrammer, erstattes  $\exp(i\alpha(l - r))$  med  $\exp(6i\alpha) + \exp(-6i\alpha)$ , svarende til to løkker med modsat orientering. Dette betyder at ligning 5.12 kan omskrives til

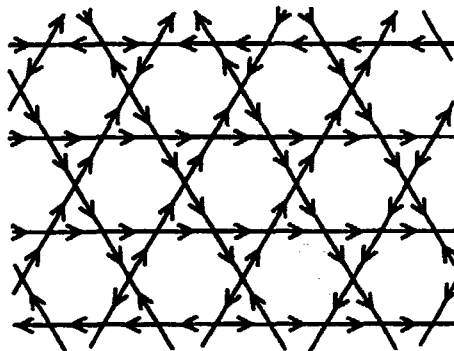
$$Z_{SOS} = \sum_{\mathcal{D}} x^L (\exp(6i\alpha) + \exp(-6i\alpha))^\Lambda = \sum_{\mathcal{D}} x^L (2 \cos 6\alpha)^\Lambda \quad (5.13)$$

hvor  $\Lambda$  er antallet af løkker i diagrammet  $\mathcal{D}$ .

Både i ligning 4.33 og ligning 5.13 summeres der over diagrammer i bikubegitteret, så det er klart at tilstandssummene for  $Z_{l\ddot{o}kke}$ - og  $Z_{SOS}$ -modellerne er de samme når vi vælger

$$n = 2 \cos(6\alpha) \quad (5.14)$$

Ved at vælge vores parameter på denne måde har vi transformeret tilstandssummen for  $SOS$ -modellen på bikubegitteret til tilstandssummen for løkke-modellen på bikubegitteret.



Figur 5.3 6V-model på et kagomé-gitter.

### 5.3 6V-model på kagomé-gitteret

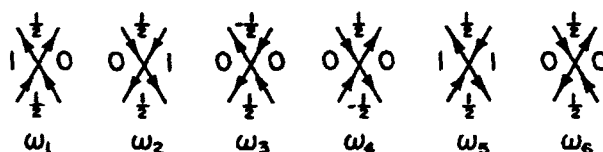
Der placeres pile i overensstemmelse med isreglen (se side 33) på alle bånd i kagomé-gitteret, og vægtene  $\omega_1$  til  $\omega_6$  tildeles gitterpunkterne svarende til pilekonfigurationerne omkring dem. De seks tilladte konfigurationer af pile omkring et gitterpunkt er vist på figur 5.4.

Pilekonfigurationer tildeles følgende vægte

$$\omega_1, \dots, \omega_6 = \tau, \tau, 1, 1, \exp(-2i\alpha), \exp(2i\alpha). \quad (5.15)$$

som er et specialtilfælde af ligning 4.37. Konfigurationerne er nummereret som på figur 5.4.

I stedet for at beregne tilstandssummen ved at summere over pilekonfigurationer, transformerer vi 6V-modellen til en SOS-model, ved at opfatte båndene i gitteret som vægge, der adskiller flader med forskellige højder. Tildel heltallige højder  $M$  til de sekskantede flader i gitteret og halvtallige højder  $m$  til de trekantede områder. Højderne begrænses så hvert  $m$  afviger med en halv fra de højder  $M$  som ligger op til, og den største højde placeres til venstre for pilens retning.



Figur 5.4 De seks tilladte pilekonfigurationer i 6V-modellen. [Nienhuis, B., 1982]

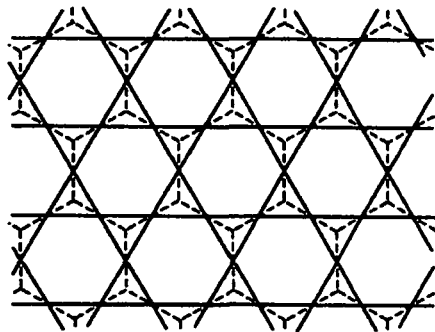
Vægtene i ligning 5.15 kan forstås som en vekselvirkning mellem fladerne: Hvis  $M$ 'erne for to nærliggende flader er forskellige, tildeles parret vægten  $\tau$ , ellers 1. Flader som støder op til hinanden med højderne  $M$  og  $m$  bidrager med  $\exp(i\alpha)$  hvis  $m > M$  og  $\exp(-i\alpha)$  hvis  $m < M$ .

Et eksempel er vist til venstre på figur 5.4 (for  $\omega_1$ ), hvor  $m_1$  og  $m_2$  begge er  $1/2$ , mens  $M_1$  og  $M_2$  er henholdsvis 1 og 0. Vægten i dette punkt

kan bestemmes således: Da  $M_1$  og  $M_2$  er forskellige, optræder en faktor  $\tau$  i vægten, mens faktoren  $\exp(-i\alpha)$  skal medtages to gange, fordi  $M_1$  er større end både  $m_1$  og  $m_2$  og et tilsvarende argument betyder at  $M_2$  bidrager med  $\exp(2i\alpha)$ . Samlet set er vægten for denne højdekonfiguration derfor

$$\omega_1 = \tau \exp(-2i\alpha) \exp(2i\alpha) = \tau \quad (5.16)$$

Dette er den første vægt i ligning 5.15. Ved at bruge analoge overvejelser, når man frem til de andre vægte.



Figur 5.5 Transformation fra kagomé-gitter til bikubegitter.

Denne måde at vægte på, betyder at de trekantede flader ikke vekselvirker med hinanden, og samlet set fås en effektiv vekselvirkning mellem  $M$ 'erne.

Vi vil nu vise at vi kan transformere 6V-modellen på kagomé-gitteret til SOS-modellen på bikubegitteret. Selve kagomé-gitteret kan omdannes til bikubegitteret ved at placere nye gitterpunkter midt i de trekantede flader og placere bånd som anvist i figur 5.5. Da de trekantede flader ikke vekselvirker med hinanden, kan de tilhørende gitterpunkter tildeles vægte, som svarer til den trekantede flades vekselvirkning med de omgivende sekskantede flader. De tre områder kan være i følgende konfigurationer

- Alle sekskantede fladers højder er ens: I dette tilfælde kan trekanten have to forskellige værdier, som enten er større eller mindre end  $M$ 'erne fra kagomé-gitteret. Hvis  $m > M$  optræder faktoren  $\exp(i\alpha)$  tre gange, mens  $m < M$  betyder at faktoren  $\exp(-i\alpha)$  optræder tre gange. Den samlede vægt for denne konfiguration er summen af disse to muligheder

$$a' = \exp(3i\alpha) + \exp(-3i\alpha) = 2 \cos(3\alpha) \quad (5.17)$$

- Én sekskantet flades højde er større end de andre: Da  $m$  højest må afvige med en halv fra hver af  $M$ 'erne, antager  $m$  den mellemliggende værdi, så den er større end to  $M$ 'er og mindre end et  $M$ . Denne forskel medfører en faktor  $\tau$  i vægten. Den samlede vægt bliver derfor

$$b' = \tau \exp(i\alpha) \exp(i\alpha) \exp(-i\alpha) = \tau \exp(i\alpha) \quad (5.18)$$



- En sekskantet flades højde er mindre end de andre: Dette svarer til andet tilfælde, hvor  $\exp(i\alpha)$  udskiftes med  $\exp(-i\alpha)$  og omvendt

$$c' = \tau \exp(-i\alpha) \quad (5.19)$$

Vægtene normaliseres ved at dividere dem alle med  $2 \cos(3\alpha)$  og  $x$  indføres som

$$x = \frac{\tau}{2 \cos(3\alpha)} \quad (5.20)$$

Vægtene bliver da

$$a, b, c = 1, x \exp(i\alpha), x \exp(-i\alpha) \quad (5.21)$$

Disse vægte svarer til dem der er angivet i ligning 5.11, og med dette valg af parametre er 6V-modellen på kagomé-gitteret derfor ækvivalent med SOS-modellen på bikubegitteret.

## 5.4 Potts-model på trekantsgitteret

Ved at placere en spintilstand  $\sigma(v) = 1, \dots, q$  i hvert gitterpunkt  $v$  i trekantsgitteret, defineres en Potts-model på trekantsgitteret. Tilstandssummen for Potts-modellen skrives

$$Z = \sum_s \prod_{\langle vv' \rangle} (1 + w)^{\delta_{\sigma(v)\sigma(v')}} \quad (5.22)$$

For et gitter bestående af  $E$  nærmeste naboer, består hver summand af et produkt af  $E$  faktorer. Hver faktor er enten 1 (når Kroneckers  $\delta$  er 0) eller  $1 + w$  (når Kroneckers  $\delta$  er 1) afhængig af systemets tilstand. Betragt en systemtilstand bestående af  $i_s$  nærmeste nabopar, som befinder sig i samme spintilstand. Da bevirker Kroneckers  $\delta$ , at summanden består af  $i_s$  faktorer, som er  $(1 + w)$  og  $E - i_s$  faktorer som er 1. Tilstandssummen kan derfor omskrives til

$$Z = \sum_s (1 + w)^{i_s} \quad (5.23)$$

og binomialformlen giver

$$Z = \sum_s \sum_{b=0}^{i_s} \binom{i_s}{b} w^b \quad (5.24)$$

Den indre sum kan erstattes af en sum over en mængde af diagrammer,  $\mathcal{D}_s$ , på trekantsgitteret, som knyttes til hver tilstand. Mængden består af alle diagrammer, der kan konstrueres efter følgende to regler:

- Diagrammerne indeholder  $b$  vægge, hvor  $0 \leq b \leq i_s$ .

- Diagrammerne har kun vægge mellem nærmeste naboer, som befinder sig i samme spintilstand.

Da der skal fordeles  $b$  vægge mellem  $i_s$  bånd i trekantsgitteret, er antallet af diagrammer med netop  $b$  vægge, som konstrueres efter ovenstående regler,  $\binom{i_s}{b}$ . Dvs. vi kan i stedet summere over diagrammer  $\mathcal{D}_s$  i ligning 5.24

$$Z = \sum_s \sum_{\mathcal{D}_s} w^b \quad (5.25)$$

Her summerer vi yderst over alle spintilstande og inderst over de diagrammer, som kan konstrueres ud fra ovenstående regler af den givne spintilstand.

I den ydre sum optræder mindst en tilstand, hvor alle gitterpunkter er i samme spintilstand. Alle diagrammer på trekantsgitteret kan konstrueres ud fra denne tilstand, så alle diagrammer på trekantsgitteret indgår i ovenstående sum. Man kan derfor tillade sig at ombytte summationen, så der først summeres over alle diagrammer på trekantsgitteret, hvorefter systemets tilstande knyttes til diagrammerne.

Der er ikke en en-til-en korrespondance mellem diagrammer og tilstande. Til hver tilstand er der knyttet en mængde af diagrammer og omvendt kan der knyttes flere tilstande til hvert diagram. Mængden af tilstande som tilhører et diagram  $\mathcal{D}$  betegner vi med  $s_{\mathcal{D}}$ . Vi når således frem til

$$Z = \sum_{\mathcal{D}} \sum_{s_{\mathcal{D}}} w^b \quad (5.26)$$

Summationen er ombyttet så der yderst summeres over alle diagrammer som kan laves på trekantsgitteret, og inderst summeres over de tilstande som tilhører hvert af disse diagrammer. Antallet af tilstande som tilhører hvert diagram, bestemmes ved følgende argumenter.

Betragt et arbitrært diagram  $\mathcal{D}$ , som indeholder  $b$  vægge og  $K$  komponenter (et enligt punkt betragtes som en komponent). En væg repræsenterer en begrænsning på antallet af tilladte tilstande, således at to gitterpunkter som forbindes af væggen skal antage samme spintilstand. Da komponenter i diagrammet er samlinger af gitterpunkter, som alle er indirekte forbundet, skal alle gitterpunkter i en komponent antage samme spintilstand. Hver komponent kan være i  $q$  forskellige spintilstande, og samlet kan diagrammet derfor tilhøre  $q^K$  forskellige tilstande.

Dette giver at summen over spintilstande, som tilhører hvert diagram i ligning 5.26, kan erstattes med  $q^K$

$$Z = \sum_{\mathcal{D}} q^K w^b \quad (5.27)$$

Summationen er over alle diagrammer på trekantsgitteret. Denne tilstandssum kan transformeres til tilstandssummen for 6V-modellen på kagomégit-teret.

### 5.4.1 Transformation til 6V-model på kagomégitret

Vi ønsker at transformere Potts-modellens tilstandssum, som den er beskrevet i ligning 5.27 til tilstandssummen for en 6V-model på kagomégitret. Der laves derfor en entydig korrespondance mellem diagrammer på trekantsgitteret og piledækninger af kagomégitret. Trekantsgitteret omdannes til kagomégitret ved brug af følgende definitioner.

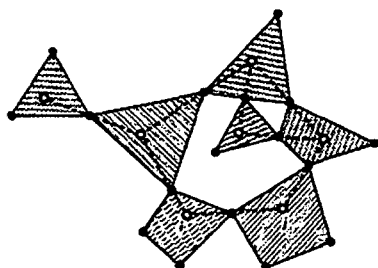
#### Definition 1 (Basale polygoner)

For et givet gitter  $\mathcal{L}$ , tegnes en polygon om hvert gitterpunkt i  $\mathcal{L}$ , så polygonerne opfylder følgende tre betingelser:

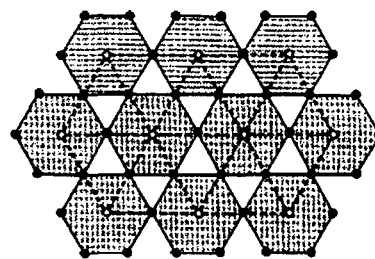
- Ingen polygoner overlapper, og ingen polygon omkranser en anden.
- Polygoner om gitterpunkter, som ikke er nærmeste naboer, har ikke noget fælles hjørne.
- Polygoner om gitterpunkter  $v$  og  $v'$ , som er nærmeste naboer, har netop et fælles hjørne, som placeres på båndet mellem  $v$  og  $v'$ .

Disse polygoner kaldes *basale polygoner*.

For at anskueliggøre de basale polygoner, skraveres det indre af hver basale polygon, som på figur 5.6, og man opfatter det skraverede område som 'land' og resten som 'vand'. På denne måde dannes et gitter, som består af en række 'øer', som hver indeholder et gitterpunkt fra  $\mathcal{L}$ . De basale polygoner giver anledning til følgende definition af et gitter.



**Figur 5.6** Et ikke-periodisk gitter  $\mathcal{L}$  (åbne cirkler og stiplede linier) og dens midtgraf  $\mathcal{M}$  (fyldte cirkler og optrukne linier). Det indre af hver basal polygon er skraveret, hvilket betegner 'land'. [Baxter, R.J., 1982]



**Figur 5.7** Trekantsgitteret og dets midtgraf, kagomégitret. [Baxter, R.J., 1982]

#### Definition 2 (Midtgraf)

For et givet gitter  $\mathcal{L}$ , dannes et nyt gitter  $\mathcal{M}$  ved at de basale polygoners hjørner er gitterpunkter i  $\mathcal{M}$ , og polygonernes kanter er bånd i  $\mathcal{M}$ . Gitteret  $\mathcal{M}$  kaldes for  $\mathcal{L}$ 's midtgraf.<sup>2</sup>

<sup>2</sup>Af engelsk: *medial graph*.

Der er to typer gitterpunkter i  $\mathcal{M}$ ; indre og ydre punkter. Et gitterpunkt kaldes for et *indre punkt*, hvis det er et fælles hjørne for to basale polygoner. Et gitterpunkt siges at være et *ydre punkt*, hvis det kun ligger på én basal polygon. De indre og ydre punkter adskiller sig ved, at de hver har henholdsvis fire og to nærmeste naboer i  $\mathcal{M}$ . Gitteret  $\mathcal{M}$  kaldes for  $\mathcal{L}$ 's midtgraf, fordi det ofte er naturligt at placere  $\mathcal{M}$ 's indre punkter midt på  $\mathcal{L}$ 's bånd.

Midtgraften er ikke et entydigt gitter, da man kan konstruere mange forskellige midtgrafer for et givet gitter. Enhver midtgraf opfylder dog at antallet af indre punkter i  $\mathcal{M}$  svarer til antallet af bånd i  $\mathcal{L}$ , mens antallet af ydre punkter varierer. Trekantsgitterets simpleste midtgraf, dvs. hvor antallet af ydre punkter er minimeret, er kagomé-gitteret. Koblingen mellem Potts-modellen på trekantsgitteret og 6V-modellen på kagomé-gitteret ligger netop i at kagomé-gitteret er trekantsgitterets midtgraf.

### Polygonopløsning af midtgraften

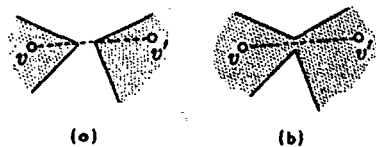
For at lave en entydig korrespondance mellem diagrammer på trekantsgitteret og en dækning af dets midtgraf med pile, opløses midtgraften i en mængde af disjunkte polygoner i henhold til diagrammer  $\mathcal{D}$  på trekantsgitteret. Vi undersøger båndet mellem nærmeste naboer  $v$  og  $v'$  i  $\mathcal{L}$ .

- Hvis  $\mathcal{D}$  ikke indeholder en væg på båndet, skal det tilsvarende indre punkt i  $\mathcal{M}$  separeres, så hjørnerne i de tilhørende basale polygoner i  $\mathcal{M}$  fjernes fra hinanden (se figur 5.8(a)).
- Hvis  $\mathcal{D}$  indeholder en væg på dette bånd, skal hjørnerne i de tilhørende basale polygoner i  $\mathcal{M}$  samles, således at de to øer bliver forbundne (figur 5.8(b)).

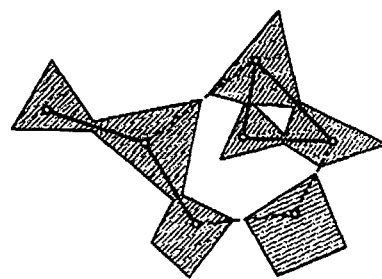
Dette gøres for alle hjørner i de basale polygoner i  $\mathcal{M}$ , hvilket opløser  $\mathcal{M}$  i  $p$  disjunkte polygoner (se figur 5.9). Polygonopløsningen er entydig for et givet diagram, og omvendt kan der ud fra en polygonopløsning laves netop et diagram på gitteret. Polygonopløsningen medfører at midtgraften ikke længere er et gitter, men en mængde af polygoner som betegnes  $\mathcal{M}'$ .

Komponenter i  $\mathcal{D}$ , som består af et enkelt gitterpunkt, opløses i små 'øer'. De komponenter i  $\mathcal{D}$ , som består af flere gitterpunkter, opløser midtgraften i store 'øer', dvs. en samling af basale 'øer', der nu er forbundne. Hver af de store og små 'øer's ydre omkreds er en polygon i den polygonopløste midtgraf. Komponenter i  $\mathcal{D}$ , der indeholder løkker, opløser midtgraften i polygoner, som indeholder 'søer', hvis omkreds ligeledes er en polygon i den polygonopløste midtgraf. Komponenter, som er omkranset af andre komponenter, polygonopløses til 'øer' i 'søer', osv.

Der er således to typer polygoner, som enten er omkredsen af en 'ø' eller omkredsen af en 'sø'. Antallet af disse polygontyper betegnes henholdsvis  $K$



**Figur 5.8** De to mulige separationer af hjørner i basale polygoner for et indre punkt i  $\mathcal{M}$ , som ligger på båndet mellem  $v$  og  $v'$  i  $\mathcal{L}$ . (a) er en situation hvor der ikke er en væg mellem  $v$  og  $v'$ , (b) er en situation hvor der er en væg. [Baxter, R.J., 1982]



**Figur 5.9** Et diagram  $\mathcal{D}$  på et gitter  $\mathcal{L}$  (optrukne linier mellem cirkler repræsenterer vægge) og den tilsvarende polygonopløsning. [Baxter, R.J., 1982]

og  $S$ .  $\mathcal{M}$  opløses derfor i  $K + S$  polygoner, så

$$p = K + S \quad (5.28)$$

For et givet diagram  $\mathcal{D}$  som indeholder  $N$  gitterpunkter og  $b$  vægge, gælder der ifølge Eulers relation at [Nielsen, F., 1989]

$$S = K - N + b \quad (5.29)$$

Indsættes ligning 5.28, når vi frem til følgende relation

$$K = \frac{p}{2} + \frac{N}{2} - \frac{b}{2} \quad (5.30)$$

Da der er en entydig korrespondance mellem diagrammer på trekantsgitteret og polygonopløste midtgrafer, kan summationen over diagrammer i ligning 5.27 udskiftes med en sum over polygonopløsninger, og tilstandssummen bliver

$$Z = \sum_{p_0} q^{\frac{p}{2} + \frac{N}{2} - \frac{b}{2}} w^b$$

Indføres variabelskiftet  $\xi = q^{-\frac{1}{2}} w$  fås

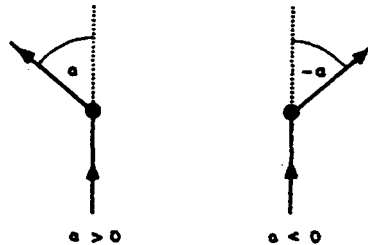
$$Z = q^{\frac{N}{2}} \sum_{p_0} q^{\frac{p}{2}} \xi^b \quad (5.31)$$

Tilstandssummen er således omskrevet til en sum over alle polygonopløsninger af midtgrafer.

## Dækning af midtgrafen med pile

Der placeres nu pile på polygonernes kanter i en polygonopløsning, således at der i hvert hjørne er en pil som peger ind mod hjørnet, og en der peger væk fra det. Da der både skal gå en pil ind i et hjørne og en ud, peger alle pilene på en polygon samme vej, dvs. enten med eller mod uret. Der er således to tilladte piledækninger af hver polygon.

Hvert hjørne i en polygon tildeles en vægt  $z^\alpha$ , hvor  $\alpha$  er vinklen til venstre for en observatør som bevæger sig i pilenes retning (se figur 5.10). Polygonens vægt dannes ved produktet af alle hjørners vægte. En observatør som følger med uret rundt i en polygon, drejer sig en vinkel  $2\pi$ , hvorved produktet af hjørnernes vægte bliver  $z^{2\pi}$ . Hvis en observatør bevæger sig mod uret rundt i en polygon bliver polygonens vægt  $z^{-2\pi}$ . Da disse to piledækninger er de eneste tilladte, bliver summen af alle tilladte piledækninger af en polygon  $z^{2\pi} + z^{-2\pi}$ .



Figur 5.10 Vinklen  $\alpha$ , som en observatør ser, når pilene følges rundt i polygonen. [Baxter, R.J., 1982]

Størrelserne  $z$  og  $\lambda$  defineres på følgende måde

$$q^{1/2} = 2 \cosh \lambda, \quad z = \exp\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right) \quad (5.32)$$

så

$$z^{2\pi} + z^{-2\pi} = 2 \cosh \lambda = q^{1/2} \quad (5.33)$$

For en given polygonopløsning af midtgrafen, kan dette resultat bruges til at vise

$$q^{p/2} = \sum_{pd} \prod_m z^{\alpha_m} \quad (5.34)$$

hvor  $m$  betegner de enkelte polygoners hjørner,  $\alpha_m$  er den tilhørende vinkel og  $pd$  er piledækninger af den polygonopløste midtgraf.

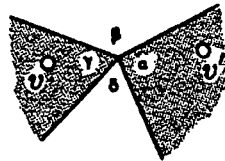
For at indse ligning 5.34, bemærkes først at dækningen af polygoner med pile sker uafhængigt af hinanden, så de enkelte polygoners vægte er uafhængige. Dette betyder, at højreside i ligning 5.34 opsplittes i et produkt af led, et for hver polygon. Vi har i ligning 5.33 fundet, at et sådant led bidrager med  $q^{1/2}$ , og de  $p$  polygoner giver venstre side af ligning 5.34.

Vi når frem til at tilstandssummen i ligning 5.31 kan omskrives til

$$Z = q^{\frac{N}{2}} \sum_{po} \xi^b \sum_{pd} \prod_m z^{\alpha_m} \quad (5.35)$$

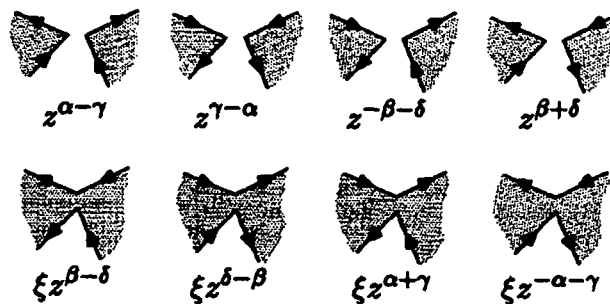
Forkortelserne  $po$  og  $pd$  betegner at den ydre sum er over alle polygonopløsninger af  $\mathcal{M}$  og den indre sum er over alle tilladte piledækninger af polygonerne i en given polygonopløsning. Produktet er over alle polygonhjørnerne  $m$ , hvor  $\alpha_m$  er den tilsvarende vinkel. Tilstandssummen skal nu omskrives, således at den er uafhængig af polygonopløsningerne af midtgrafene. Det gør, at vi kan ignorere polygonopløsningerne og kun betragte piledækninger af midtgrafene.

Der er fire vinkler  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , og  $\delta$  omkring et gitterpunkt i  $\mathcal{M}$ , som angivet i figur 5.11. Fremover betegner vi vinklerne  $\alpha_m$  med disse græske bogstaver.



Figur 5.11 Et indre punkt i  $\mathcal{M}$  og vinklerne mellem kanterne. [Baxter, R.J., 1982]

Ved en polygonløsning opløses hvert indre punkt i  $\mathcal{M}$  i to hjørner. To hjørner på en polygon i  $\mathcal{M}'$  som svarer til disse indre punkter, hører derfor sammen. Et hjørnes vægt multipliceres med  $\sqrt{\xi}$ , hvis det tilhører et gitterpunkt som er opløst som angivet i figur 5.8(b). Et  $\xi$  angiver således en diagramvæg mellem de to gitterpunkter i  $\mathcal{L}$ . På denne måde kan vi overføre informationer om diagramvægge til vægten.



Figur 5.12 De otte mulige pilekonfigurationer i  $\mathcal{M}'$ , omkring indre punkter i  $\mathcal{M}$ . [Baxter, R.J., 1982]

Der er otte forskellige pilekonfigurationer af hjørnepar i  $\mathcal{M}'$  som tilhører samme indre punkt i  $\mathcal{M}$  (se figur 5.12). Deres vægte kan beregnes ud fra vinklerne  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  og  $\delta$  og om de er separerede.

Af disse otte pilekonfigurationer er fire parvis ens i  $\mathcal{M}$ , fordi vi ikke skelner mellem de to måder at separere  $\mathcal{M}$ s indre punkter vist i figur 5.8. På figur 5.12 er de fire konfigurationer, som er hhv. nummer et og to fra højre, sådanne par. De seks tilbageværende pilekonfigurationer, som et indre punkt i  $\mathcal{M}$  kan være i, opfylder isreglen og er vist på figur 5.13. På denne figur svarer parrene til hjørne 5 og 6. Tilstandssummen i ligning 5.35 kan gøres uafhængig af polygonopløsningerne af midtgrafen, hvis vi blot summerer over nogle bestemte piledækninger af midtgrafen, som vi definerer om lidt.



Figur 5.13 De seks mulige pilekonfigurationer i  $\mathcal{M}$ . [Baxter, R.J., 1982]

### Istype-modeller på midtgrafen

Vi starter med at placere pile på alle bånd i  $\mathcal{M}$ , således at isreglen er opfyldt i alle indre punkter og der i de ydre punkter går en pil ind og en ud. Piledækninger som opfylder disse krav kaldes for tilladte. Hver af disse piledækninger kan optræde i den dobbelte summation i ligning 5.35, men nogle må optræde mere end en gang, fordi pilekonfiguration 5 og 6 kan opstå på to måder.

Antag at en bestemt piledækning af  $\mathcal{M}$  samlet set indeholder  $b$  gitterpunkter af type 5 og 6. Hver af konfigurationerne 1-4 svarer til en entydig separation af gitterpunktets kanter i en polygonopløsning. Gitterpunkter af typen 5 og 6 svarer derimod til to mulige valg for separation af kanter. Denne piledækning svarer derfor til  $2^b$  polygonopløsninger og optræder således  $2^b$  gange i ligning 5.35.

Men da disse separationsvalg kan foretages uafhængigt er det ikke noget problem at beregne det totale bidrag fra denne piledækning til ligning 5.35: man summerer blot hhv. hjørne 5's og 6's vægte. Med disse vægte kan ligning 5.35 omskrives til en sum over samtlige piledækninger på  $\mathcal{M}$  som opfylder isreglen. Vi får

$$Z = q^{\frac{N}{2}} \sum_{pd} \prod_i \omega_i^{n_i} \quad (5.36)$$

hvor  $n_i$  angiver antallet af gitterpunkter med vægten  $\omega_i$ . Summationen er over alle tilladte piledækninger af  $\mathcal{M}$ , og produktet er over alle gitterpunkter i  $\mathcal{M}$ .



De seks forskellige gitterpunkter på figur 5.13 har derfor vægtene

$$\begin{aligned}
 \omega_1 &= z^{\alpha-\gamma} \\
 \omega_2 &= z^{\gamma-\alpha} \\
 \omega_3 &= \xi z^{\beta-\delta} \\
 \omega_4 &= \xi z^{\delta-\beta} \\
 \omega_5 &= z^{-\beta-\delta} + \xi z^{\alpha+\gamma} \\
 \omega_6 &= z^{\beta+\delta} + \xi z^{-\alpha-\gamma}
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

De græske bogstaver refererer til vinklerne på figur 5.11.

Da  $\beta = \delta = \frac{\pi}{3}$  og  $\gamma = \alpha = \frac{2\pi}{3}$  for kagomégitret og der per definition gælder at  $z = \exp\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)$ , er vægtenes værdier

$$\omega_1 = 1 \tag{5.38}$$

$$\omega_2 = 1 \tag{5.39}$$

$$\omega_3 = \xi \tag{5.40}$$

$$\omega_4 = \xi \tag{5.41}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_5 &= \exp\left(-\frac{\lambda}{2\pi} \frac{2\pi}{3}\right) + \xi \exp\left(\frac{\lambda}{2\pi} \frac{4\pi}{3}\right) \\
 &= \exp\left(-\frac{\lambda}{3}\right) + \xi \exp\left(2\frac{\lambda}{3}\right)
 \end{aligned} \tag{5.42}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_6 &= \exp\left(\frac{\lambda}{2\pi} \frac{2\pi}{3}\right) + \xi \exp\left(-\frac{\lambda}{2\pi} \frac{4\pi}{3}\right) \\
 &= \exp\left(\frac{\lambda}{3}\right) + \xi \exp\left(-2\frac{\lambda}{3}\right)
 \end{aligned} \tag{5.43}$$

Ved at dividere alle vægte med  $\xi$  og sætte  $1/\xi = \tau$ , normaliseres vægtene og de første fire vægte stemmer overens med ligning 5.15. Derudover vælges

$$\tau = -2 \cos(-i\lambda), \quad \alpha = -i\frac{2\lambda}{3} + \frac{\pi}{2} \tag{5.44}$$

Dette betyder at

$$\begin{aligned}
 \exp(2i\alpha) &= \exp\left(2i\left(-2i\frac{\lambda}{3} + \frac{\pi}{2}\right)\right) \\
 &= \exp(i\pi) \exp\left(\frac{4\lambda}{3}\right) \\
 &= -\exp\left(\frac{4\lambda}{3}\right)
 \end{aligned} \tag{5.45}$$

og tilsvarende

$$\exp(-2i\alpha) = -\exp\left(-\frac{4\lambda}{3}\right) \tag{5.46}$$

$\tau$  kan omskrives ved at bruge Eulers formel

$$\begin{aligned}\tau &= -(\exp(i(-i\lambda)) + \exp(-i(-i\lambda))) \\ &= -\exp(\lambda) - \exp(-\lambda)\end{aligned}\quad (5.47)$$

Dette betyder at

$$\begin{aligned}\tau \exp\left(-\frac{\lambda}{3}\right) &= -(\exp(\lambda) + \exp(-\lambda)) \exp\left(-\frac{\lambda}{3}\right) \\ &= -\exp\left(\frac{2\lambda}{3}\right) - \exp\left(\frac{-4\lambda}{3}\right)\end{aligned}\quad (5.48)$$

så vægten  $\omega_5$  i ligning 5.42 er derfor

$$\begin{aligned}\omega_5 &= -\exp\left(\frac{2\lambda}{3}\right) - \exp\left(\frac{-4\lambda}{3}\right) + \exp\left(\frac{2\lambda}{3}\right) \\ &= -\exp\left(\frac{-4\lambda}{3}\right)\end{aligned}\quad (5.49)$$

hvilket i følge ligning 5.46 er lig med  $\exp(-2i\alpha)$ . Tilsvarende kan man vise, at  $\omega_6$  i ligning 5.43 og 5.15 er den samme, hvis man benytter ligning 5.45. Vægtene er således

$$\omega_1, \dots, \omega_6 = \tau, \tau, 1, 1, \exp(-2i\alpha), \exp(2i\alpha). \quad (5.50)$$

Vi kan derfor konkludere, at 6V-modellen og Potts-modellen har identiske egenskaber. Ved denne transformation har vi nu bestemt et tilstrækkeligt antal parametre til at udregne løkkemodellens kritiske værdi.

## 5.5 Opsamling

Det sidste skridt består i at bestemme værdien af løkkemodellens kritiske punkt ud fra de fundne parametre. Vi fandt ved transformationen af løkke-modellens tilstandssum til SOS-modellens tilstandssum at  $n$  kan skrives

$$n = 2 \cos(6\alpha) \quad (5.51)$$

Transformationen af SOS-modellens tilstandssum til 6V-modellens tilstandssum gav at

$$x = \frac{\tau}{2 \cos(3\alpha)} \quad (5.52)$$

Sidst gav transformationen af Potts-modellens tilstandssum at

$$\alpha = -i\frac{2\lambda}{3} + \frac{\pi}{2} \quad (5.53)$$

$$\tau = -2 \cos(-i\lambda) \quad (5.54)$$

I følge Nienhuis giver renormaliseringsteknikken, at løkkemodellens kritiske punkt, er hvor disse ligninger har skæringspunkt.

Der er i alt fire ligninger med fem ubekendte og vi kan således bestemme  $x_c$  som funktion af  $n$ . Vi indfører variabelen  $\phi$ , som gør det lettere at finde  $x_c$

$$\phi = -\frac{i\lambda}{3} \quad (5.55)$$

Med denne variabel er parametrene

$$\alpha = 2\phi + \frac{\pi}{2} \quad (5.56)$$

$$\tau = -2 \cos(3\phi) \quad (5.57)$$

$$n = -2 \cos(12\phi) \quad (5.58)$$

$$x = \frac{\tau}{2 \cos\left(6\phi + \frac{3\pi}{2}\right)} \quad (5.59)$$

Den sidste ligning giver sammen med ligning 5.56

$$4 \cos^2\left(6\phi + \frac{3\pi}{2}\right) x^2 = 4 \cos^2(3\phi) \Leftrightarrow \quad (5.60)$$

$$2(\cos(12\phi + 3\pi) + 1)x^2 = 2 \cos(6\phi) + 2 \Leftrightarrow \quad (5.61)$$

$$(n + 2)x^2 = 2 \cos(6\phi) + 2 \quad (5.62)$$

Højresiden kan omskrives vha.

$$\cos^2(6\phi) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(12\phi) = \frac{1}{2} - \frac{n}{4} \quad (5.63)$$

så

$$\cos(6\phi) = \pm \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{n}{4}} \quad (5.64)$$

Da  $q$  skal være mindst 1, betyder koblingen mellem  $\phi$  og  $q$ , at vi skal vælge den negative rod. Vi kan derfor omskrive ligning 5.62 til

$$(n + 2)x^2 = 2 - \sqrt{2 - n} \Leftrightarrow x^2 = \frac{2 - \sqrt{2 - n}}{n + 2} \quad (5.65)$$

Da

$$(2 - \sqrt{2 - n})(2 + \sqrt{2 - n}) = n + 2 \quad (5.66)$$

når vi frem til

$$x^2 = \frac{1}{2 + \sqrt{2 - n}} \quad (5.67)$$

Det kritiske punkt er derfor

$$x_c = \frac{1}{\sqrt{2 + \sqrt{2 - n}}} \quad (5.68)$$

Når  $n$  er lig med nul, får vi at forbindelseskonstanten  $\mu$  for den selvundvigende vandring på bikubegitteret er givet ved

$$\mu = \sqrt{2 + \sqrt{2}} \quad (5.69)$$

For  $n = 1$  svarer Nienhuis' løkkemodell til den to-dimensionale Ising-model, mens den svarer til overgangen fra super- til normalflydende for heliumfilm, for  $n = 2$ . Værdierne i ligning 5.68 giver de kendte resultater for de kritiske værdier for disse modeller. Løkkemodellen er derfor ikke kun i overensstemmelse med resultater for den selvundvigende vandring men ligeledes med fysiske resultater.

## 6 Diskussion

Matematikken og fysikken leverer to vidt forskellige indgangsvinkler til bestemmelse af forbindelseskonstantens værdi for bikubegitteret. For at besvare problemformuleringen sammenligner vi de to indgangsvinkler, og finder deres respektive fordele og ulemper. De to indgangsvinkler adskiller sig dels ved typen af resultater de leverer, dels i matematisk stringens. Den matematiske tilgang opfattes som stringent, mens den fysiske beskrives som heuristisk. Det er derfor nødvendigt at foretage en statusopgørelse fra en matematisk synsvinkel af den fysiske tilgang, dvs. undersøge, hvor argumentationen er stringent. Den matematiske stringens defineres her, som i hvor høj grad argumenterne kan føres tilbage de grundlæggende aksiomer i matematikken.

### 6.1 Den matematiske tilgang

Den selvundvigende vandring minder meget om en random walk, som bevæger sig tilfældigt mellem et gitters nærmeste naboer. En random walk er dog ikke begrænset af, at den ikke må vende tilbage til et gitterpunkt. Som vi har set volder besvarelsen af den selvundvigende vandring to centrale spørgsmål (hvad er antallet af vandring som går  $n$  skridt, og hvor stor er den gennemsnitlige afstand til udgangspunktet) store vanskeligheder, men disse problemer og adskillige andre er løst for random walken. Da de to vandring minder meget om hinanden, er det naturligt at forsøge at overføre løsningsmetoderne.

Årsagen til forskellen i mængden af løsninger skal findes i at random walken er en Markov-kæde i modsætning til den selvundvigende vandring. Markov-egenskaben gør at det er muligt at løse problemer indenfor teorien for random walken ved at opstille rekursionsformler. Metoden som anvendes i random walk udgør et paradigme for besvarelsen af spørgsmål angående vandring, men kan ikke overføres til den selvundvigende vandring, fordi der ikke kan opstilles rekursionsformler for denne vandring.

Hammersley-Mortons sætning fastlægger eksistensen af forbindelseskonstanten og er stringent bevist. Sætningen er grundlæggende for hele den matematiske analyse af den selvundvigende vandring og det er et stærkt matematisk resultat at der eksisterer en konstant, som styrer antallet af selvundvigende vandring. Desværre har det endnu ikke været muligt at give stringente argumenter for forbindelseskonstantens eksakte værdi, men man kan opstille nedre og øvre grænser.

Det overordnede princip i begge de beskrevne matematiske metoder er at finde en mængde af vandringer, som enten er større eller mindre end mængden af selvundvigende vandringer. 'Forbindelseskonstanten' for disse mængder er da henholdsvis større eller mindre end forbindelseskonstanten  $\mu$  for den selvundvigende vandring.

I Fisher og Sykes' metode udvælges en delmængde af de selvundvigende vandringer, hvis kardinalitet det er muligt at opstille en rekursionsformel for og derved finde delmængdens 'forbindelseskonstant'. Metoden er let tilgængelig, og giver rimelig gode resultater. Rekursionsteknikken er velkendt blandt matematikere, og metoden er en meget naturlig tilgang til at løse denne type problemer. Fisher og Sykes' tilgang er traditionel i den forstand, at de bruger en metode som har vist sig frugtbar i forbindelse med random walk, nemlig at opstille rekursionsformler. De kan dog ikke finde en sådan formel for selve problemet men for et andet problem, hvis løsning siger noget om det oprindelige problem.

Fisher og Sykes' metode giver, at værdien af bikubegitterets forbindelseskonstant opfylder

$$\mu \geq 1,7872 \quad (6.1)$$

Alm danner en mængde som er større end mængden af selvundvigende vandringer og indeholder mængden af selvundvigende vandringer. Ved hjælp af en smart teknik, kan en øvre grænse for  $\mu$  findes ved at bestemme den maksimale egen værdi af en matrix. Princippet i denne metode er et resultat fra Hammersley-Mortons sætning, som blev vist i 1954. Alms metode er derfor ikke nyskabende, hvad angår det overordnede princip, men den teknik som udnytter dette princip.

Vi fandt at Alms metode gav følgende bånd på bikubegitterets forbindelseskonstant

$$\mu \leq 1,87603 \quad (6.2)$$

Begge metoder er således traditionelle, hvad angår det grundlæggende princip, men nyskabende i de teknikker som udnytter disse principper. Metoderne har desuden den fordel, at de kan benyttes til at finde forbindelseskonstanten for langt flere gitre end bikubegitteret.

## 6.2 Den fysiske tilgang

Fra et matematisk synspunkt er princippet i den fysiske metode at bestemme konvergensradius for den selvundvigende vandrings frembringende funktion, fordi denne radius er den reciproke værdi af forbindelseskonstanten. Den frembringende funktion indgår i den magnetiske susceptibilitet for Nienhuis' løkke model, hvis kritiske punkt netop er knyttet til konvergensradius. Metoden til at finde dette punkt er dels transformationer mellem flere statistiske mekaniske modeller, dels renormaliseringsteknikken.

Vi fandt at den fysiske metode giver en eksakt værdi af bikubegitterets forbindelseskonstant på

$$\mu = \sqrt{2 + \sqrt{2}} = 1,847759065 \dots \quad (6.3)$$

Fysikken er således i stand til at finde en værdi af forbindelseskonstanten, som er i overensstemmelse med numeriske og analytiske resultater og generelt accepteres som en korrekt værdi.

Som det fremgår af vores beskrivelse, er den fysiske tilgang meget omstændelig, specielt kræver beviset for ækvivalensen af 6V-modellen på kagomé-gitteret og Potts-modellen på trekantsgitteret en del krumspring. Dette bevis er et standardresultat indenfor denne branche af fysik, som man sædvanligvis bare refererer til. Dertil kommer, at metoden kun giver en værdi for bikubegitterets forbindelseskonstant, og ikke umiddelbart kan overføres til andre gitters forbindelseskonstant.

Artiklerne, som beskriver den fysiske metode, er publiceret i fysiske tidskrifter og ikke matematiske, hvilket både argumentationen og sproget bærer præg af, således at artiklerne fremtræder som umatematiske. Dertil kommer, at matematikerne opfatter argumentationen som heuristisk. Det er derfor vigtigt at undersøge i hvor høj grad det umatematiske i fremstillingen skyldes forskelle i sprog og kultur eller reelle uoverensstemmelser om substansen. Sagt på en anden måde: Hvilke dele af argumentationen kan løsrives fra den fysiske fortolkning og formaliseres matematisk og gøres stringente, og hvor er dette ikke muligt. Grænsen  $n \rightarrow 0$  er klart diskutabel, og behandles derfor selvstændigt i afsnit 6.4.

## 6.3 Hvilke dele af den fysiske metode er stringente?

Vi undersøger derfor de forskellige dele af fysikernes argumentation, med henblik på om de kan gøres matematiske.

### 6.3.1 Statistisk mekanik

Statistisk mekanik er en del af teoretisk fysik, som bruges til at forstå fysiske fænomener, men teorien kan formuleres matematisk uafhængigt af den fysiske virkelighed. De indgående parametre som temperatur, Boltzmanns konstant, energi og spin, kan løsrives fra deres fysiske fortolkning. Temperaturen og Boltzmanns konstant opfattes som konstanter med fastsatte værdier, mens energien fortolkes som en funktion af systemets tilstand og spinnet som en vektor. Det statistisk mekaniske sandsynlighedsmål til at tildele tilstande sandsynligheder, kan derfor indpasses i den sædvanlige matematiske sandsynlighedsteori. Vores formulering af de grundlæggende principper i statistisk mekanik er ikke aksiomatisk opbygget, men det virker som om, at dette kan gøres. Den underliggende teori for Nienhuis' argumentation er

derfor stringent, og giver ikke nogen problemer. Desuden skal det slås fast at selvom teorien for kritiske fænomener bruges til at motivere sprogbrugen for modellernes opførsel, når de divergerer, skal man ikke forledes til at tro, at sammenhængen mellem disse fænomener og modellerne er mere end en analogi.

### 6.3.2 Koblingen mellem forbindelseskonstanten og løkkemodellens kritiske punkt

Det første trin i Nienhuis' argumentation for forbindelseskonstantens værdi er at vise, at  $\mu$  er lig med den reciprokke værdi af løkkemodellens kritiske punkt. Susceptibiliteten har en fysisk fortolkning, som den afledte af magnetiseringen med hensyn til det magnetiske felt. Den susceptibilitet Nienhuis bruger er derimod defineret ud fra spinvektorer i modellen og kan således opfattes som løsrevet fra den fysiske fortolkning.

Ses der bort fra at grænsen hvor vi lader  $n$  gå mod nul er tvivlsom, er både definitionen af Nienhuis løkkemodel og udledning af den magnetiske susceptibilitet, stringente fra et matematisk synspunkt.

### 6.3.3 De statistisk mekaniske modeller – og transformationerne mellem dem

I argumentationen benyttes en række statistisk mekaniske modeller, som alle er defineret forskelligt. Et fælles træk er dog, at man ved Hamiltonfunktionen fastlægger vekselvirkningen mellem partiklerne i systemet, og derved danner tilstandssummen. Ved at vælge energierne af de enkelte partiklers tilstande rigtigt får man at de forskellige modeller kan beskrives ved den samme tilstandssum. Systemer med samme tilstandssum har alle samme makroskopiske egenskaber, hvilket giver os det endelige resultat, at alle modellerne har samme kritiske punkt.

Modellerne defineres på forskellig vis og har hver deres fysiske anvendelse. Modellernes definition afhænger selvfølgelig af deres konkrete anvendelse, men kan uden problemer løsrives fra denne. Sprogbrugen er dog motiveret af fysik, f.eks. istype-modeller eller spinvektorer, men en nærmere undersøgelse viser, at denne sprogbrug alene bygger på en analogi med et bestemt fysisk fænomen. For istype-modeller er der en analogi mellem en bestemt måde at lave orienterede grafer og fænomenet is, og der overføres ikke yderligere egenskaber ved is. Modellerne er derfor ikke et kildent emne for matematikere.

Den matematiske stringens i den fysiske argumentation er godt gemt i Nienhuis' artikler. Det har derfor været et stort arbejde at udrede alle trådene i den fysiske argumentation, og arbejdet er endnu ikke færdiggjort hvis alle argumenterne skal føres tilbage til de grundlæggende matematiske aksiomer. Vi mener dog at vi har gjort argumentationen mere gennemskuelig og stringent, omend der stadig er implicitte antagelser og randproblemer flere steder



i argumentationen. Vi har således undersøgt transformationerne mellem de forskellige modeller, og fundet at de på ingen måde involverer nødvendige referencer til fysiske fænomener. Transformationen mellem modellerne er af matematisk og ikke fysisk karakter og er i princippet stringent.

### 6.3.4 Renormalisering

Det sidste led i argumentationen bygger på renormalisering, som vi ikke har undersøgt. Vi er derfor ikke i stand til at vurdere om dette trin er stringent. Vi antager dog at renormaliseringsdelen er eksakt, fordi hele den fysiske metode i følge Hughes er det. [Hughes, H.D., 1995]

Vi har nu undersøgt de forskellige trin i argumentationen og er nået frem til at den statistiske mekanik og anvendelsen af den i argumentationen, kan opfattes som stringent. Det er dog muligt at renormaliseringsdelen ikke er stringent. Det sidste problem, som vi endnu ikke har behandlet, er grænsen, hvor dimensionen af spinvektorerne går mod nul.

## 6.4 Grænsen $n \rightarrow 0$

I vores fremstilling af den fysiske metode til at bestemme forbindelseskonstanten for bikubegitteret følger vi Hughes' fremgangsmåde, som i modsætning til Nienhuis, gør opmærksom på brugen af grænseværdien hvor  $n$  går mod nul via Sarmas kvasi-lemma. Kvasi-lemmaet bygger på Sarmas gisning, som siger at produktet af en vektors komponent med sig selv er 1, i grænsen hvor dimensionen af vektoren går mod nul. Dette betyder, at produktet af vektorens nul'te komponent med sig selv er 1, hvilket opfattes som nonsens af matematikere. Dette rejser følgende spørgsmål

- Hvor bruges grænsen  $n \rightarrow 0$  i argumentationen, og kan de argumenter, som involverer denne grænse, erstattes?
- Hvordan kan man fortolke grænsen  $n \rightarrow 0$ ?

### 6.4.1 Hvor bruges grænsen $n \rightarrow 0$ ?

Grænsen  $n \rightarrow 0$  benyttes to gange i den fysiske argumentation. Første gang til at udtale sig om værdien af løkkemodellens tilstandssum i denne grænse

$$\lim_{n \rightarrow 0} Z_{l\ddot{o}kke} = 1 \quad (6.4)$$

Denne ligning når man frem til ud fra løkkemodellens tilstandssum

$$Z_{l\ddot{o}kke} = \left\langle \prod_{\langle vv' \rangle} (1 + x \mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v')) \right\rangle_A \quad (6.5)$$

Ved brug af løkke- og kædelemmaet omskrives denne til

$$Z_{\text{løkke}} = \sum_{\mathcal{D}} x^L n^N \quad (6.6)$$

Ved at lade  $n$  gå mod nul, når man frem til ligning 6.4.

I denne udledning bruges Sarmas kvasi-lemma implicit til at legitimere at omskrivningen i ligning 6.6 ikke kun gælder for positive, heltallige værdier af  $n$ , men ligeledes når  $n \rightarrow 0$ . Vi når frem til at  $Z = 1$  hvis vi i ligning 6.5 simpelthen sætter  $\mathbf{S}(v) \cdot \mathbf{S}(v') = 0$ , så antagelsen om at Sarmas gisning er korrekt, virker ikke så drastisk.

Hughes skriver at vi ved at opfatte  $n$  i ligning 6.6 som en parameter, og definere tilstandssummen ved denne ligning i stedet for ved ligning 6.5, kan løse problemet. Defineres  $Z_{\text{løkke}}$  på denne måde er Sarmas kvasi-lemma ikke nødvendigt, og vi kan således vise ligning 6.4 stringent. Problemet med denne fremgangsmåde er, at vi ikke blot ønsker tilstandssummen som funktion af  $n$ , men også en fortolkning af den i termer af spinvektorer.

Når vi kobler parkorrelationsfunktionen til den selvundvigende vandrings frembringende funktion, opstår der tilsvarende problemer. Parkorrelationsfunktionen er defineret ved

$$G(v_j, v_i) = \langle (S_1(v_j) S_1(v_i)) \rangle \quad (6.7)$$

og vi nåede frem til

$$\lim_{n \rightarrow 0} \sum_{v_j} G(v_i, v_j) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m x^m \quad (6.8)$$

ved at bruge løkke- og kædelemmaet. Som i tilfældet med tilstandssummen er Sarmas kvasi-lemma nødvendigt for at retfærdiggøre overgangen fra positive værdier af  $n$  til grænsen  $n \rightarrow 0$ . Et andet problem er at parkorrelationsfunktionens definition kræver at spinvektoren  $\mathbf{S}$  har en første komponent. I grænsen hvor  $n$  går mod nul er denne funktion derfor ikke veldefineret og fortolkningen af den som korrelationen mellem spinnene i to gitterpunkter, bliver meningsløs. Defineres parkorrelationsfunktionen ved ligning 6.8, løber vi ind i samme problemer som tidligere.

Argumentet, som involverer grænsen, hvor  $n$  går mod nul, kan således ikke umiddelbart erstattes, idet fortolkningen som vektorkomponenter er nødvendig.

#### 6.4.2 De forskellige opfattelser af $n \rightarrow 0$

Blandt de forfattere, vi har læst, er der uforenelige opfattelser af hvordan grænsen  $n \rightarrow 0$  skal fortolkes, og hvorvidt argumenter som bygger på resultater for denne grænse, er acceptable. Man kan groft set tale om to opfattelser, matematikernes og fysikernes. Denne skelnen bygger på en ren sociologisk forskel, som bunder i deres ansættelsessted.

**Fysikernes opfattelse** Fysikerne Nienhuis og Cardy opfatter  $n$  som en parameter. Nienhuis skriver

*In many representations the partition sum is expressed in a form in which  $n$  is simply a parameter and may then be given non-natural values.*[Nienhuis, B., 1987]

og Cardy skriver

*We see from (9.7) [ligning 6.6] that the partition function may be defined for non-integer values of  $n$ .*[Cardy, J., 1996]

Den sædvanlige fortolkning, som fysikerne giver af grænsen  $n \rightarrow 0$ , er at den selvundvigende vandring er analog til en nul-komponent ferromagnet.

**Matematikernes opfattelse** Matematikerne omtaler konsekvent Nienhuis' metode som eksakt, men ikke stringent. Guttman skriver f.eks.

*Very recently Nienhuis (1982) has presented very convincing physical arguments (though not rigorous mathematical ones) that, for the honeycomb lattice, the exact value of  $\mu$  is  $(2 + \sqrt{2})^{1/2} = 1.847\ 759\dots$* [Guttman, A.J., 1983]

og Hughes skriver om Nienhuis' metode

*The analysis is not rigorous, but is exact in the sense that no arguments given involve any apparent approximation.*[Hughes, H.D., 1995]

Baggrunden for matematikernes indvending er at man ikke ved hvordan modellen skal forstås, når  $n$  ikke er et positivt helt tal.

Fysikerne udtaler sig om tilstandssummen, som den er angivet i ligning 6.6, hvor det er muligt at opfatte  $n$  som en parameter. Nienhuis' selv bruger ikke eksplicit parkorrelationsfunktionen, og undgår derved at fortolke antallet af komponenter i 0-dimensional vektor, hvorimod Cardy benytter sig af parkorrelationsfunktionen, uden nærmere forklaring. Matematikerne henviser blot til resultatet som ikke-stringent og undlader at forsøge at fortolke en 0-dimensionel vektor.

I udledningen af sit lemma, skriver Sarma (som er fysiker), intet om problemerne ved grænsen, hvor  $n$  går mod nul, så han må mene, at der ikke er noget problem. Dette betyder, at han ikke beskæftiger sig med fortolkningen af sit lemma[Sarma, G., 1975]. Vi fortolker denne holdning, som at han mener, at lemmaet er en gyldig sætning, og altså ikke et kvasi-lemma, som vi har kaldt det.

Løkkemodellen er en del af en større klasse af modeller, spinmodellerne, som fysikerne bruger. I denne klasse findes modeller, hvor spin-vektoren har

uendelig dimension og i visse tilfælde negativ dimension. Indenfor teoretisk fysik opereres der således med vektorer hvis dimensioner er underlige, men fortolkningen af dem er dog omstridt blandt fysikerne. Nobelpristageren Kenneth G. Wilson skriver f.eks. at den fysiske mening af et negativt antal spinkomponenter ikke er klar. [Wilson, K.G., 1979]

Fysikerne opfatter den selvundvigende vandring som en nul-komponent ferromagnet. Man skulle tro, at de har et problem med denne fortolkning, for det er spinnets, som giver en ferromagnet dens magnetiske egenskaber, og man kunne indvende at en nul-komponent ferromagnet derfor er en selvmodsigelse. Men dette er jo snarere fysikernes end matematikernes problem.

Hvad angår fysikerne, kan vi således konkludere at de ikke mener at deres tilgang til den selvundvigende vandring indebærer nogen problemer, og at grænseovergangen  $n \rightarrow 0$  ikke behøver en fortolkning.

På den anden side mener matematikerne, at der er et stort problem, og at grænsen kræver en fortolkning. Der er, så vidt vi kan se, flere muligheder for at 'løse' denne situation fra et matematisk synspunkt. Den ene mulighed er den som vi har fremlagt, hvor der formuleres en gisning som man antager er korrekt og som benyttes til at vise Sarmas kvasi-lemma. Under forudsætningen af at gisningen er korrekt og giver mening, er den fysiske metode korrekt. Fremtiden vil så forhåbentlig vise om gisningen er rigtig eller ej. Den anden mulighed er at udvide en sætning, som gælder for heltallige og positive værdier til at gælde for værdier, som er ikke-heltallige eller 0, og dernæst definerer grænsen  $n \rightarrow 0$  ved denne udvidelse af sætningens gyldighedsområde. Det er dette Madras og Slade gør.

### 6.4.3 Madras og Slades metode

Den overordnede struktur i Hughes' og Madras og Slades måde at redegøre for Nienhuis' argumentation, er den samme. Den består af to dele; en omskrivning af tilstandssummen for løkkemodellen og et bevis for sammenhængen mellem  $\mu$  og den kritiske værdi for løkkemodellen.

Madras og Slades argumentation bygger på en generalisering af identiteten svarende til ligning 4.11

$$\langle S_j(v) S_k(v) \rangle_A = \begin{cases} 1 & \text{for } j = k \\ 0 & \text{for } j \neq k \end{cases} \quad (6.9)$$

Dette er formuleret som følgende lemma

#### Lemma 6.1

Fastlæg et heltal  $n \geq 1$ . Lad  $S = (S_1, S_2, \dots, S_n)$  betegne en vektor som er ligefordelt på mængden af  $n$ -dimensionelle vektorer som har længden  $\sqrt{n}$ .

Givet ikke-negative heltal  $k_1, \dots, k_n$ , gælder

$$\langle S_1^{k_1} \dots S_n^{k_n} \rangle_A = \begin{cases} \frac{2\Gamma(\frac{n+2}{2}) \prod_{i=1}^n \Gamma(\frac{k_i+1}{2})}{\pi^{n/2} \Gamma(\frac{k_1+\dots+k_n+n}{2})} n^{(k_1+\dots+k_n-2)/2} & \text{alle } k_i \text{ lige} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (6.10)$$

Vi vil ikke vise dette lemma, men henvise til Madras og Slade, s. 48-49.

Madras og Slade bruger lemma 6.1 til at definere hvad de mener med grænsen  $n \rightarrow 0$  for de middelværdier, som optræder i Sarmas kvasi-lemma. Antag at der for et  $i$  gælder at  $k_i = 2$  og at for alle  $l \neq i$  er  $k_l = 0$ . I dette tilfælde giver lemmaet

$$\langle S_i^2 \rangle_A = 1 \quad (6.11)$$

Denne ligning er uafhængig af  $n$ , så Madras og Slade definerer at den ligeledes gælder i grænsen hvor  $n$  går mod nul. Hvis  $k_1 + \dots + k_n > 2$  bliver middelværdien af spinproduktet  $S_1^{k_1} \dots S_n^{k_n}$  proportional med en potens af  $n$ , og i grænsen hvor  $n \rightarrow 0$ , definerer Madras og Slade derfor middelværdien af dette spinprodukt til 0.

Resten af Madras og Slades argumentation er den samme som Hughes', idet de viser at løkkemodellens tilstandssum er 1 når  $n \rightarrow 0$ , og at parkorrelationsfunktionen for løkkemodellen er den samme som den selvundvigende vandrings frembringende funktion i denne grænse. Madras og Slades argumentation bygger på det de kalder en plausibel fortolkning af grænserne i ligning 6.4 og 6.8, hvorved de *definerer* grænserne ved disse ligninger. De skriver, at deres argumenter, som fører til disse to ligninger, således ikke er stringente matematiske påstande. Madras og Slades metode løser derfor ikke de problemer, som Hughes støder ind i, idet deres definitioner blot rykker dem til et andet sted.

#### 6.4.4 Historiske paralleller

Inden vi samler konklusionerne op, drager vi nogle paralleller til matematikkens historie.

Der hersker stort set enighed om, at Nienhuis' værdi af  $\mu$  for bikubegitteret er korrekt, men i "beviset" bruger man en sætning for værdier udenfor dens domæne. Det er velkendt, at matematikkens historie indeholder eksempler på tilsvarende situationer, hvor resultater anvendes, hvis grundlag ikke er helt fasttømret, f.eks. de komplekse tal og Diracs  $\delta$ -funktion.

I løsninger af trediegradsligninger optrådte kvadratrødder af negative tal, men ved at ignorere den manglende fortolkning af dem og bare klø på med udregningerne, gik de komplekse tal i visse tilfælde ud med hinanden og man opnåede reelle løsninger. Efterfølgende kunne disse løsninger sættes ind i den oprindelig ligning, og det viste sig at de var løsninger. Den manglende fortolkning af disse objekter var uholdbar i længden, og forsøget på at fortolke dem førte til fremkomsten af ny matematik.

Fysikerne har længe brugt en speciel "funktion", Diracs  $\delta$ -funktion  $\delta(x)$ . Denne funktion er 0 på hele den reelle akse bortset fra i punktet 0, hvor den er uendelig og integralet af  $\delta(x)$  fra  $-\infty$  til  $\infty$  giver 1. Diracs  $\delta$ -funktion er derfor ikke en funktion i sædvanlig forstand, men den spiller en vigtig rolle i fysikken. Sådanne funktioner førte til fremkomsten af den matematiske teori for generaliserede funktioner [Davis & Hersh, 1981].

Man kunne drage paralleller mellem disse to eksempler fra matematikens historie og vore dages situation med de selvundvigende vandringer, og håbe på at forsøg på at fortolke grænsen hvor dimensionen  $n$  af en vektor går mod nul, vil føre til fremkomsten af ny matematik. Et sådant optimistisk syn overser dog to ting. For det første er der ligeledes eksempler fra matematikkens historie på at resultater som byggede på et løst grundlag efter noget tid blev forkastet. For det andet er det så vidt vi ved, kun ét problem man løser, ved at antage at grænsen hvor  $n$  går mod nul giver mening, mens både de komplekse tal og Diracs *delta*-funktion kan bruges i en vifte af problemer.

## 6.5 Konklusion

Vi konkluderer at matematikkens og fysikkens tilgang til den selvundvigende adskiller sig på en række punkter, og de har hver deres deres fordele og ulemper.

Matematikerne søger en løsning, som er i overensstemmelse med den resterende matematiske teori for således at opbygge en konsistent teori. Dette begrænser deres muligheder, da den selvundvigende vandring ikke kan løses eksakt ved brug af de sædvanlige matematiske redskaber. I stedet for at opfinde nye metoder, benyttes tilgange som har vist sig brugbare inden for beslægtede problemer. Disse metoder til at bestemme forbindelseskonstanten er forholdsvis simple, hvilket medfører at de kun giver uligheder for  $\mu$ , men samtidig at de kan bruges på mange forskellige gitre.

Er man fysiker er det mere vigtigt at et resultat er rigtigt end at det er stringent fra et matematisk synspunkt. Fysikerne accepterer derfor Nienhuis' værdi for bikubegitteret, fordi det stemmer overens med numeriske resultater. Ved at se stort på matematisk stringens, er det lykkedes Nienhuis at koble den selvundvigende vandring på bikubegitteret til et fysik standardresultat. Denne kobling benytter implicit Sarmas gisning, hvis fortolkning falder uden for det matematiske begrebsapparat. Fysikkens metode giver en formodentlig eksakt værdi for forbindelseskonstanten, men er specifikt knyttet til bikubegitteret, og udnytter dette gitters struktur og kan derfor ikke umiddelbart overføres til andre gitre.

Hvis fysikkens metode skal overføres til matematik, er det nødvendigt at retfærdiggøre Sarmas kvasi-lemma. Det resterende af metoden er efter vores mening stringent, og adskiller sig ikke grundlæggende fra den almindelige matematiske tankegang. Fysikken bruger nogle metoder, som er opstået i fysiske

sammenhænge men som let kan løsrives fra disse. Fysikken og matematikken er fælles om princippet med at overføre et problem til et standardresultat, hvis løsning er kendt.

Resultaterne af den matematiske og den fysiske metode stemmer overens da vi fandt i ligning 3.17, 5.69 og 3.45 at forbindelseskonstanten opfylder

$$1,7872 \leq \sqrt{2 + \sqrt{2}} = 1,847759065 \dots \leq 1,87603$$

Værdierne stammer fra henholdsvis Fisher og Sykes' metode, Nienhuis' metode, og Alms metode. Både Fisher og Sykes' og Alms metoder er de metoder, som giver de bedste stringente resultater, men der er stadig langt til den formodentlig eksakte værdi, som Nienhuis har fundet for bikubegitterets forbindelseskonstant.

# Litteratur

- [Ahlberg & Janson, 1981] AHLBERG, R. & S. JANSON  
Upper Bounds for the Connectivity Constant  
Uppsala University Report, Uppsala, 1981
- [Alm, S.E., 1991] ALM, S.E.  
Upper Bounds for the Connective Constant of Self-avoiding Walks  
Uppsala University Report, Uppsala, 1991
- [Baxter, R.J., 1982] BAXTER, R.J.  
Exactly Solved Models in Statistical Mechanics  
Academic Press, London, 1982
- [Cardy, J., 1996] CARDY, J.  
Scaling and Renormalization in Statistical Physics  
Cambridge University Press, Cambridge, 1996
- [Daoud et al., 1975] DAUD, M., J.P. COTTON, B. FARNOUX, G. JANNINK, G. SARMA,  
H. BENOIT, R. DUPLESSIX, C. PICOT, & P.G. DE GENNES  
Solutions of flexible polymers. Neutron experiments and interpretation  
Macromolecules, vol. 8, 804-818, 1975
- [Davis & Hersh, 1981] DAVIS, P.J. & HERSH, R.  
The Mathematical Experience  
Birkhäuser, Boston, 1981
- [Domb, C., 1969] DOMB, C.  
Self-avoiding Walks on Lattices  
Artikel i [Shuler, K.E., 1969]
- [Domb & Lebowitz, 1987] DOMB, C. & J.L. LEBOWITZ(red.)  
Phase Transitions and Critical Phenomena, vol. 11  
Academic Press, London, 1987
- [Fisher & Sykes, 1959] FISHER, M.E. & M.F. SYKES  
Exclude-Volume Problem and the Ising Model of Ferromagnetism  
Physical review, vol. 114, nr. 1, 45-48, 1959
- [Guttmann, A.J., 1983] GUTTMANN, A.J.  
Bounds on Connective Constants for Self-avoiding Walks  
Journal of Physics A, vol. 16, 2233-2238, 1983
- [Horn & Johnson, 1985] HORN, R.A. & C.R. JOHNSON  
Matrix Analysis  
Cambridge University Press, Cambridge, 1985
- [Hughes, H.D., 1995] HUGHES, H.D.  
Random Walks and Random Environments, vol. 1: Random Walks  
Clarendon Press, Oxford, 1995



- [Karlin & Taylor, 1975] KARLIN, S. & H.M. TAYLOR  
A First Course in Stochastic Processes, 2. udgave  
Academic Press, San Diego, 1975
- [Kesten, H., 1982] KESTEN, H.  
Percolation Theory for Mathematicians  
Birkhäuser, Boston, 1982
- [Lindstrøm, T., 1995] LINDSTRØM, T.  
Kalkulus  
Universitetsforlaget, Oslo, 1995
- [Madras & Slade, 1993] MADRAS, N. & G. SLADE  
The Self-Avoiding Walk  
Birkhäuser, Boston, 1993
- [Nielsen, F., 1989] NIELSEN, F.  
Grafer og netværk  
Matematisk institut DTH, Lyngby, 1989
- [Nienhuis, B., 1982] NIENHUIS, B.  
Exact Critical Point and Critical Exponents of  $O(n)$  Models in two dimensions  
Physical Review Letters, vol. 49, nr. 15, 1062-1065, 1982
- [Nienhuis, B., 1987] NIENHUIS, B.  
Coulomb Gas Formulation of Two-dimensional Phase Transitions  
Artikel i [Domb & Lebowitz, 1987]
- [Sarma, G., 1975] G. SARMA  
Appendix til [Daoud et al., 1975]
- [Shuler, K.E., 1969] SHULER, K.E. (red.)  
Stochastic Processes in Chemical Physics  
Advances in chemical physics, vol. XV, San Diego, 1969
- [Slade, G., 1994] G. SLADE  
Self-Avoiding Walks  
The Mathematical Intelligencer, vol. 16, Nr. 1, 29-35, 1994
- [Wilson, K.G., 1979] WILSON, K.G.  
Problems in Physics with Many Scales of Length  
Scientific American, vol. 241, nr. 2, 140-157, 1979
- [Yeomans, J.M., 1992] YEOMANS, J.M.  
Statistical Mechanics of Phase Transitions  
Oxford University Press, New York, 1992

Liste over tidligere udsendte tekster kan rekvireres  
på IMFUFA's sekretariat, tlf. 4674 2263 eller  
e-mail: bs@ruc.dk

- 332/97 ANOMAL SWELLING AF LIPIDE DOBBELTLAG  
Specialerapport af:  
Stine Sofia Korremann  
Vejleder: Dorthe Posselt
- 333/97 Biodiversity Matters  
an extension of methods found in the literature  
on monetisation of biodiversity  
by: Bernd Kuemmel
- 334/97 LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH  
ENERGY SYSTEM  
by: Bernd Kuemmel and Bent Sørensen
- 335/97 Dynamics of Amorphous Solids and Viscous Liquids  
by: Jeppe C. Dyre
- 336/97 PROBLEM-ORIENTATED GROUP PROJECT WORK AT  
ROSKILDE UNIVERSITY  
by: Kathrine Legge
- 337/97 Verdensbankens globale befolkningsprognose  
- et projekt om matematisk modellering  
af: Jørn Chr. Bendtsen, Kurt Jensen,  
Per Pauli Petersen  
Vejleder: Jørgen Larsen
- 338/97 Kvantisering af nanolederes elektriske  
ledningsevne  
Første modul fysikprojekt  
af: Søren Dam, Esben Danielsen, Martin Niss,  
Esben Friis Pedersen, Frederik Resen Steenstrup  
Vejleder: Tage Christensen
- 339/97 Defining Discipline  
by: Wolfgang Coy
- 340/97 Prime ends revisited - a geometric point  
of view -  
by: Carsten Lunde Petersen
- 341/97 Two chapters on the teaching, learning and  
assessment of geometry  
by Mogens Niss
- 342/97 LONG-TERM SCENARIOS FOR GLOBAL ENERGY  
DEMAND AND SUPPLY  
A global clean fossil scenario discussion paper  
prepared by Bernd Kuemmel  
Project leader: Bent Sørensen
- 343/97 IMPORT/EKSPORT-POLITIK SOM REDSKAB TIL OPTIMERET  
UDNYTTELSE AF EL PRODUCERET PÅ VE-ANLÆG  
af: Peter Meibom, Torben Svendsen, Bent Sørensen
- 344/97 Puzzles and Siegel disks  
by Carsten Lunde Petersen
- 
- 345/98 Modeling the Arterial System with Reference to  
an Anesthesia Simulator  
Ph.D. Thesis  
by: Mette Sofie Olufsen
- 346/98 Klyngedannelse i en hulkatode-forstøvningsproces  
af: Sebastian Horst  
Vejledere: Jørn Borggren, NBI, Niels Boye Olsen
- 347/98 Verificering af Matematiske Modeller  
- en analyse af Den Danske Eulerske Model  
af: Jonas Blomqvist, Tom Pedersen, Karen Timmermann,  
Lisbet Øhlenschläger  
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 348/98 Case study of the environmental permission  
procedure and the environmental impact assessment  
for power plants in Denmark  
by: Stefan Krüger Nielsen  
Project leader: Bent Sørensen
- 349/98 Tre rapporter fra FAGMAT - et projekt om tal  
og faglig matematik i arbejdsmarkedsuddannelserne  
af: Lena Lindenskov og Tine Wedege
- 350/98 OPGAVESAMLING - Bredde-Kursus i Fysik 1976 - 1998  
Erstatter teksterne 3/78, 261/93 og 322/96
- 351/98 Aspects of the Nature and State of Research in  
Mathematics Education  
by: Mogens Niss

- 352/98 The Herman-Swiatec Theorem with applications  
by: Carsten Lunde Petersen
- 353/98 Problemløsning og modellering i en almendannende matematikundervisning  
Specialerapport af: Per Gregersen og Tomas Højgaard Jensen  
Vejleder: Morten Blomhøj
- 354/98 A GLOBAL RENEWABLE ENERGY SCENARIO  
by: Bent Sørensen and Peter Meibom
- 355/98 Convergence of rational rays in parameter spaces  
by: Carsten Lunde Petersen and Gustav Ryd
- 356/98 Terrænmodellering  
Analyse af en matematisk model til konstruktion af terrænmodeller  
Modelprojekt af: Thomas Frommelt, Hans Ravnkjær Larsen og Arnold Skimminge  
Vejleder: Johnny Ottesen
- 357/98 *Cayleys Problem*  
*En historisk analyse af arbejdet med Cayley problem fra 1870 til 1918*  
*Et matematisk videnskabsfagsprojekt af:*  
*Rikke Degn, Bo Jakobsen, Bjarke K.W. Hansen, Jesper S. Hansen, Jesper Udesen, Peter C. Wulff*  
Vejleder: Jesper Larsen
- 358/98 *Modeling of Feedback Mechanisms which Control the Heart Function in a View to an Implementation in Cardiovascular Models*  
Ph.D. Thesis by: Michael Danielsen
- 359/99 *Long-Term Scenarios for Global Energy Demand and Supply Four Global Greenhouse Mitigation Scenarios*  
by: Bent Sørensen
- 360/99 **SYMMETRI I FYSIK**  
*En Meta-projektrapport af: Martin Niss, Bo Jakobsen & Tine Bjarke Bonné*  
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 361/99 *Symplectic Functional Analysis and Spectral Invariants*  
by: Bernhelm Booss-Bavnbek, Kenro Furutani
- 362/99 *Er matematik en naturvidenskab? - en udspejling af diskussionen*  
*En videnskabsfagsprojekt-rapport af Martin Niss*  
Vejleder: Mogens Nørgaard Olesen
- 363/99 **EMERGENCE AND DOWNWARD CAUSATION**  
by: Donald T. Campbell, Mark H. Bickhard and Peder V. Christiansen
- 364/99 *Illustrationens kraft*  
*Visuel formidling af fysik*  
*Integreret speciale i fysik og kommunikation*  
af: Sebastian Horst  
Vejledere: Karin Beyer, Søren Kjølrup
- 365/99 *To know - or not to know - mathematics, that is a question of context*  
by: Tine Wedege
- 366/99 **LATEX FOR FORFATTERE**  
*En introduktion til LATEX og IMFUA-LATEX*  
af: Jørgen Larsen
- 367/99 **Boundary Reduction of Spectral Invariants and Unique Continuation Property**  
by Bernhelm Booss-Bavnbek
- 368/99 Kvartalsrapport for projektet  
Scenarier for samlet udnyttelse af brint som energibærer i Danmarks fremtidige energisystem  
Projektleder: Bent Sørensen  
Opdateret til halvvejsrapport. Den nye udgave Tekst 368bis kan hentes ned fra internettet fra adressen <http://mmf.ruc.dk/energy/report>
- 369/99 Dynamics of Complex Quadratic Correspondences  
by: Jacob Jalving
- 370/99 **OPGAVESAMLING**  
Bredde-Kursus i Fysik 1976 - 1999  
(erstatte tekst nr. 350/98)
- 371/99 **Bevisets stilling - beviser og bevisførelse i en gymnasial matematikundervisning**  
Matematikspeciale af: Maria Hermannsson  
Vejleder: Mogens Niss
- 372/99 En kontekstualiseret matematikhistorisk analyse af ikke lineær programmering: Udviklingshistorie og multipel opdagelse  
Ph.d.-afhandling af Tinne Hoff Kjeldsen
- 373/99 **Criss-Cross Reduction of the Maslov Index and a Proof of the Yosida-Nicolaescu Theorem**  
by: Bernhelm Booss-Bavnbek, Kenro Furutani and Nobukazu Otsuki
- 374/99 **Det hydrauliske spring**  
Et eksperimentelt studie af polygoner  
Og hastighedsprofiler  
Specialeafhandling af Anders Marcussen  
Vejledere: Tomas Bohr, Clive Ellegaard og Bent C. Jørgensen

376/99 Universality of AC conduction in  
disordered solids  
by: Jeppe Dyre, Thomas B. Schröder

377/99 The Kuhn-Tucker Theorem in  
Nonlinear Programming:  
A Multiple Discovery  
By: Tinne Hoff Kjeldsen