Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

О. А. Васильев, С. К. Нечаев, О топологических корреляциях в тривиальных узлах: новые аргументы в пользу представления о складчатой полимерной глобуле, *ТМФ*, 2003, том 134, номер 2, 164–184

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf155>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.198.67.100

26 апреля 2023 г., 08:02:23

О ТОПОЛОГИЧЕСКИХ КОРРЕЛЯЦИЯХ В ТРИВИАЛЬНЫХ УЗЛАХ: НОВЫЕ АРГУМЕНТЫ В ПОЛЬЗУ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О СКЛАДЧАТОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ГЛОБУЛЕ

Дано обоснование представления о фрактальной складчатой структуре сильно сколлапсированной незаузеленной полимерной цепи, в которой цепь по топологическим причинам образует плотную систему складок, взаимно сегрегированных на всех масштабах. Исследованы топологические корреляции в случайно генерированных узлах на прямоугольных решетках (полосках) данных шириин. Изучены вероятности спонтанного формирования тривиального узла, а также вероятности того, что любая конечная часть тривиального узла, после естественного замыкания концов также является тривиальной. Сложность узла характеризуется старшей степенью полиномиального топологического инварианта Джонса–Кауффмана. Показано, что на длинных полосках сложность узла прямо пропорциональна длине полоски. В то же время типичная сложность “квазиузла”, являющегося составной частью тривиального узла, существенно меньше. Проведенный анализ дает основание полагать, что в этом случае сложность пропорциональна квадратному корню из длины полоски. Полученные результаты однозначно указывают на то, что топологическое состояние любой части тривиального узла, плотно заполняющего решетку, также близко к тривиальному.

Ключевые слова: узлы, полимеры, топологические инварианты, броуновский мост, неевклидова геометрия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что новые интересные задачи часто возникают на стыке традиционных областей. Примером новой области, формирующейся в настоящее время, является статистическая топология, родившаяся из слияния статистической физики, теории интегрируемых систем, алгебраической топологии и теории групп. К области статистической топологии относятся, с одной стороны, математические проблемы построения топологических инвариантов узлов и зацеплений на основе решений ряда интегрируемых моделей, а с другой стороны — физические задачи определения энтропии случайных узлов и зацеплений.

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, Москва, Россия. E-mail: vasilyev@itp.ac.ru

†Université Paris Sud XI, Orsay, France. E-mail: nechaev@ipno.in2p3.fr

К последней теме можно отнести и данную работу, в которой современные методы алгебраической топологии, связанные с вычислением алгебраических инвариантов узлов, использованы для подтверждения фрактальной структуры незаузленной кольцевой полимерной макромолекулы. В качестве модели сколлапсированной полимерной цепи мы использовали решеточный узел, плотно заполняющий прямоугольную решетку. Топологические свойства узла задаются “проходами” и “переходами” – порядком пересечения вертикальных и горизонтальных нитей в каждой вершине решетки на плоской диаграмме узла. Случайный узел проще всего получить, генерируя с заданной вероятностью тип пересечения, т.е. “проход” или “переход”, независимо в каждой вершине. Для определения топологического состояния узла K используется полиномиальный инвариант Джонса–Кауффмана $f_K[x]$. Соответственно “сложность” узла характеризуется старшей степенью n его полиномиального инварианта,

$$n = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\ln f_K[x]}{\ln x}. \quad (1)$$

В данной работе показано, что условие тривиальности плотного узла как целого накладывает столь сильные ограничения на возможные топологические состояния любого участка узла, что этот участок становится практически “незаузленным”¹⁾.

Интерес к рассматриваемой проблеме связан с существенным влиянием топологии замкнутой полимерной цепи на ее термодинамические свойства. Рассмотрим кольцевую самонепересекающуюся полимерную цепь длины N без узлов (т.е. в тривиальном топологическом состоянии). Из того, что замкнутая цепь не может пересекать сама себя, следует, во-первых, наличие объемных взаимодействий, которые исчезают для бесконечно тонких цепей, и во-вторых, появление топологических ограничений, которые сохраняются даже для цепей нулевой толщины. При достаточно высокой температуре макромолекула представляет собой сильнофлуктуирующую систему, называемую “клубком”, без достоверного термодинамического состояния. Однако ниже некоторой критической температуры θ формирование слабофлуктуирующей конденсированной (глобулярной) структуры макромолекулы становится термодинамически выгодным (см. [1], [2]). В этих классических работах, обсуждавших фазовый переход “клубок–глобула” в линейной макромолекуле *без учета топологических ограничений*, было показано, что энтропийный вклад в энергию глобулярного состояния при температуре $T < \theta$ незначителен, в связи с чем оно может быть описано в вириальном приближении, т.е. с помощью констант двух- и трехчастичных взаимодействий $B = b(T - \theta)/\theta < 0$ и $C > 0$ (см. также [3]).

Рассматривая глобулярное состояние кольцевой незаузленной макромолекулы, в дополнение к стандартным объемным взаимодействиям следует также принять во внимание нелокальные топологические ограничения, имеющие характер отталкивания. Учет всех факторов в рамках самосогласованного феноменологического рассмотрения [4] позволил прийти к заключению, что отсутствие узлов на замкнутой в кольцо макромолекуле очень сильно влияет на все термодинамические характеристики и ведет к новым

¹⁾Разумеется, о топологическом состоянии участка узла следует говорить весьма приблизительно и правильнее использовать данное ниже понятие “квазиузла”.

фрактальным свойствам траектории цепи в глобуле. Такая структура сколлапсированной полимерной цепи была названа *складчатой (фрактальной) глобулой*.

Специфической особенностью складчатой глобулы является то, что на всех масштабах, начиная с некоторого наименьшего g^* (определяемого температурой и конкретными физическими свойствами полимера) и вплоть до максимального, участки цепи не перепутаны друг с другом и плотно заполняют предоставленный им объем, т.е. “сколлапсированы сами в себе”. Иными словами, линия, представляющая траекторию цепи, является трехмерным аналогом хорошо известной самоподобной *кривой Пеано* [5]. Можно было бы ожидать, что пространственные флуктуации разрушают такую термодинамически невыгодную масштабно-инвариантную структуру, приводя к перепутыванию участков цепи, однако, основываясь на самосогласованных (в значительной степени качественных) аргументах, в работе [4] было показано, что складки не перемешиваются, оставаясь сегрегированными в пространстве.

Непосредственная экспериментальная проверка описанной самоподобной фрактальной структуры незаузленного кольцевого полимера в сколлапсированной фазе сталкивается со значительными техническими трудностями. Тем не менее экспериментальные данные, перечисленные ниже, могут рассматриваться в качестве косвенного подтверждения существования складчатой глобулы: а) двухстадийная динамика линейной макромолекулы после резкого ухудшения качества растворителя, предсказанная в работе [4] и обнаруженная в экспериментах по светорассеиванию [6]; б) объяснение эффекта улучшения совместимости в расплаве кольцевых и линейных полимеров [7]; в) количественное описание коллапса N -изопропилакриламидного геля в воде при изменении температуры [8]; г) возможное наблюдение складчатой глобулы в численном эксперименте [9].

Вместе с тем вопрос о прямом доказательстве существования термодинамически достоверной структуры типа складчатой глобулы, реализующейся в сильно сжатых (сколлапсированных) замкнутых полимерных цепях без узлов (т.е. находящихся в тривиальном топологическом состоянии), до сих пор остается открытым. В связи с этим изучение распределения случайно генерированных плотных узлов (определение см. ниже) по различным топологическим типам может существенно помочь в понимании структуры фазового пространства незаузленных полимеров в глобулярной фазе. Этот вопрос и является предметом исследования данной работы.

В разделе 2 дается постановка задачи и описание метода генерации плотного узла. В разделе 3 кратко описан алгоритм вычисления полиномиального инварианта. В разделе 4 приведены результаты численного эксперимента. Раздел 5 содержит интерпретацию полученных результатов в терминах произведения случайных матриц и выводы.

2. МОДЕЛЬ ПЛОТНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ УЗЛОВ И ПОНЯТИЕ “КВАЗИУЗЛА”

Ниже приводятся аргументы в пользу идеи складчатой глобулы на основе непосредственного определения топологического состояния *участка* плотного узла при условии того, что *весь* узел целиком является тривиальным. В работе использованы некоторые

современные методы алгебраической топологии для построения неабелевых топологических инвариантов узлов [10]–[12], адаптированные в статьях [13], [14] к решению статистико-топологических задач.

Прежде всего следует определить топологическое состояние участка кольцевой цепи. Разумеется, математически строгое определение топологического состояния существует лишь для замкнутого (или бесконечного) контура. Тем не менее очевидно, что даже незамкнутая достаточно длинная нить может быть заузлена. Таким образом, представляется привлекательным ввести понятие *квазиузла* для описания нитей со свободными концами. Впервые подобные идеи высказывались в работе [15] при анализе глобулярного состояния полимерной цепи.

Пусть имеется незамкнутая полимерная цепь в глобулярном состоянии. Расстояние R между концами цепи в глобуле по порядку величины составляет $aN^{1/3}$, т.е. гораздо меньше, чем контурная длина цепи $L \sim Na$, где N – число звеньев (мономеров) и a – размер элементарного звена полимера. Поэтому топологическое состояние замкнутой петли, представляющей собой объединение самой незамкнутой нити и отрезка, соединяющего ее концы, могло бы характеризовать топологию рассматриваемой цепи в целом. Такую составную петлю следует рассматривать как *квазиузел* для линейной цепи. Следует отметить, что концепция квазиузла потерпела неудачу при попытке описания гауссовых цепей, где большие пространственные флуктуации расстояния между концами цепи приводят к неопределенности квазитопологического состояния.

Перейдем к описанию изучаемой модели. Рассмотрим множество случайно генерированных *плотных* узлов на решетке в трехмерном пространстве²⁾. Узел назовем “плотным”, если нить, образующая его, плотно заполняет решетку и не имеет возможности флуктуировать в пространстве. В этом случае конфигурационная энтропия узлов разных топологических типов отсутствует, и вероятность образования узла заданного топологического типа определяется исключительно локальной топологией системы.

Модель плотных узлов, разумеется, является предельно упрощенной, так как она не учитывает флуктуационные степени свободы решеточного узла. Тем не менее мы полагаем, что она отвечает физической ситуации, имеющей место в статистической физике конденсированного (глобулярного) состояния полимерных молекул. Рассмотренная в работе [4] складчатая глобулярная фаза кольцевой незаузленной макромолекулы существует при большой плотности полимера, т.е. именно в области “плотных узлов”.

Конфигурация нити в трехмерном пространстве не очень удобна для определения топологического типа узла. Стандартный прием заключается в следующем: узел проектируется на плоскость *в общем положении*, т.е. так, чтобы в каждой точке плоскости пересекалось не более двух участков узла. Для каждой точки пересечения определяется, какая линия проходит сверху (“проход”), а какая – снизу (“переход”), согласно пространственной топологии узла. Такую проекцию, оснащенную “проходами” и “переходами”, называют *диаграммой узла*. Далее мы будем работать исключительно со статистикой диаграмм узлов. Разумеется, это вносит дополнительное упрощение в ис-

²⁾ Далее мы будем говорить лишь об узлах, имея в виду как узлы, так и зацепления. Там, где необходимо, мы будем отдельно отмечать разницу между узлами и зацеплениями.

следуемую модель, делая ее квазидвумерной. Однако мы полагаем, что в рассматриваемой фазе плотных узлов данное ограничение не очень существенно, поскольку, как было сказано выше, вклад в энтропию узла от флуктуаций нити отсутствует.

Итак, рассмотрим прямоугольную решетку M размера $N = L_v \times L_h$ на плоскости. Заполним решетку (плотно) траекторией, имеющей пересечения в каждой вершине, явно указав при этом, какая нить проходит сверху, а какая – снизу (пример решетки 3×5 показан на рис. 1а. Решетка модели Поттса Λ , соответствующая узлу, изображенному на рис. 1а, показана на рис. 1в. На рис. 1а кружками отмечено положение спинов Поттса. Нетрудно проверить, что если N нечетно, то траектория, плотно покрывающая решетку, единственна, т.е. представляет собой узел, топология которого однозначно определяется “проходами”, “переходами” и граничными условиями. Тем самым вероятность реализации узла заданного топологического типа определяется распределением “проходов” и “переходов” в каждой вершине решетки. Перенумеруем все пересечения на диаграмме узла индексом k и сопоставим k -му пересечению нити переменную $\epsilon_k = \pm 1$ согласно правилу

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & & \uparrow \\ \leftarrow & \epsilon_k = -1, & \leftarrow \\ \downarrow & & \downarrow \end{array} \quad \begin{array}{ccc} \uparrow & & \uparrow \\ \leftarrow & \epsilon_k = +1, & \leftarrow \\ \downarrow & & \downarrow \end{array}$$

Статистическая задача, рассматриваемая в данной работе, формулируется следующим образом. Пусть имеется случайно генерированное множество “проходов” и “переходов” $\{\epsilon_k\}$ таких, что $\epsilon_k = +1$ генерируется с вероятностью p , а $\epsilon_k = -1$ – с вероятностью $1 - p$ независимо в каждой вершине при условии, что каждый набор “проходов” и “переходов” обязательно задает в целом тривиальный узел. Нас будет интересовать топологическое состояние квазиузла, образованного участком нити длиной cN ($0 < c < 1$) при условии, что весь узел, образованный нитью длиной N , тривиален.

3. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИНВАРИАНТ И СЛОЖНОСТЬ УЗЛА

В любой топологической задаче основной проблемой является сравнение узлов. В данной работе топологическое состояние узла характеризуется алгебраическим полиномиальным инвариантом Джонса–Кауффмана [10], [11]. Введем переменную $b_{i,j}$, которая играет роль беспорядка на ребрах решетки Поттса Λ (рис. 1в), соответствующей решетке узла M (рис. 1а). Соотношение между переменными $b_{i,j}$ и ϵ_k задается следующим образом:

$$b_{i,j} = \begin{cases} -\epsilon_k, & \text{если связь } (i, j) \text{ идет вправо вверх,} \\ \epsilon_k, & \text{если связь } (i, j) \text{ идет вправо вниз.} \end{cases} \quad (2)$$

На рис. 1в связи модели Поттса с константой $b_{i,j} = 1$ обозначены сплошными линиями, а с константой $b_{i,j} = -1$ – пунктирными. Результаты работ [13], [14] позволяют представить полиномиальный топологический инвариант Кауффмана $f_K(x)$ от переменной x регулярно изотопических узлов на решетке M в виде статистической суммы дву-

Рис. 1. а – Тривиальный узел 3×5 , положение спинов Поттса отмечено кружками. б – Узел 3×3 , полученный отрезанием куска от узла 3×5 и замыканием согласно граничным условиям. в – Решетка спинов модели Поттса, соответствующая тривиальному узлу 3×5 , на решетке 3×5 . г – Решетка спинов модели Поттса, соответствующая тривиальному узлу 3×5 , трансформированная к виду 2×6 . д – Соответствие трансфер-матриц P, P^*, R, R^* ферро- и антиферромагнитным связям на решетке Поттса.

мерной модели Поттса на дуальной решетке Λ

$$f_K(x, \{b_{i,j}\}) = K(x, \{b_{i,j}\}) Z(q(x), \{J_{i,j}(b_{i,j}, x)\}), \quad (3)$$

где

$$K(x, \{b_{i,j}\}) = \left(-\sqrt{x} - \frac{1}{\sqrt{x}}\right)^{-(N_p+1)} (-\sqrt{x})^{\sum_{\{i,j\}} b_{i,j}} \quad (4)$$

представляет собой тривиальный множитель, не зависящий от поттсовских спинов, N_p – общее число спинов Поттса, а статистическая сумма модели Поттса имеет вид

$$Z(q(x), \{J_{i,j}(b_{i,j}, x)\}) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\sum_{\{i,j\}} \frac{J_{i,j}(b_{i,j}, x)}{T} \delta(\sigma_i, \sigma_j)\right). \quad (5)$$

Константа взаимодействия $J_{i,j}$ и число состояний q определены формулами

$$\frac{J_{i,j}}{T} = \ln(-x^{b_{i,j}}), \quad q = x + 2 + x^{-1}. \quad (6)$$

В работе [14] численными методами определялась вероятность $P\{f_K\}$ того, что среди всех 2^N возможных реализаций беспорядка $\{\epsilon_k\}$, $k = 1, \dots, N$, найдется решеточный узел в топологическом состоянии с заданным инвариантом Кауффмана f_K . Эта вероятность формально может быть записана в виде

$$P_N\{f_K\} = \frac{1}{2^N} \sum_{\{\epsilon_k\}} \delta(f_K(x, \{\epsilon_1, \dots, \epsilon_N\}) - f_K). \quad (7)$$

Таким образом, топологический беспорядок, определенный случайным независимым выбором пересечений типа $\epsilon_k = +1$ и $\epsilon_k = -1$, является случайным замороженным внешним полем.

При использовании инварианта Кауффмана каждый топологический тип плетенки узла K характеризуется полиномом $f_K[x]$. В этом случае для детальной идентификации топологического типа узла на решетке с N пересечениями потребуется порядка N переменных. Число разных топологических типов растет по порядку величины как 2^N , в связи с чем изучать вероятность каждого отдельного типа, характеризуемого N переменными, очень трудно. Поэтому мы рассмотрим упрощенную характеристику решеточного узла – старшую степень n его полиномиального инварианта (1). Для тривиального узла $n = 0$. По мере увеличения сложности узла старшая степень растет, не превосходя значения $n = N$. Таким образом, все множество решеточных узлов мы разбиваем на подклассы, каждый из которых характеризуется степенью n полиномиального инварианта Кауффмана. В работе [14] изучалась вероятность $P(n)$ того, что случайный узел (плетенка) принадлежит одному из этих подклассов, т.е. характеризуется степенью n инварианта Кауффмана.

4. ЧИСЛЕННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ КВАЗИУЗЛОВ НА ПОЛОСКАХ

В данном разделе с помощью комбинации численных и аналитических методов исследуется основной вопрос данной работы – определение типичного топологического состояния некоторой части плетенки при условии, что вся плетенка в целом образует тривиальный узел (т.е. топологически изоморфна незаузеленному кольцу). Еще раз отметим, что топологическое состояние узла характеризуется старшей степенью n его алгебраического полинома (инварианта Кауффмана). Поэтому необходимо несколько модифицировать постановку задачи. А именно мы изучаем топологические корреляции не только в плетенках, эквивалентных тривиальному узлу, но и во всех плетенках, характеризующихся старшей степенью $n = 0$ инварианта Кауффмана. Среди множества плетенок с $n = 0$ есть и не тривиальные узлы, но их относительная сложность мала, и в целом можно говорить о том, что узлы с $n = 0$ “близки к тривиальным”. Этот вопрос достаточно подробно обсуждался в работе [14].

Рис. 2. Зависимости средней старшей степени полинома $n(L_h)$ для узла на полоске шириной $L_v = 5$ от длины полоски L_h для концентраций примесей $p = 0.05, 0.1$ и результаты аппроксимации.

В численных исследованиях мы ограничились изучением топологических корреляций в плетенках, имеющих форму полосок размерами $L_v \times L_h$, где L_v – ширина полоски ($L_v = 3; 5$) и L_h – длина полоски ($L_h = 3 \div 60$). Кроме того, чтобы набрать достаточную статистику при больших длинах полосок, мы рассматриваем существенно асимметричную ситуацию в вероятностях генерации “прохода”, $p = 0.05; 0.1$. Напомним, что при $p = 0$ имеется единственная конфигурация плетенки, отвечающая тривиальному узлу.

4.1. Безусловное распределение. В дальнейшем при изучении топологических корреляций в узлах и условных распределений понадобятся некоторые вспомогательные построения. Мы будем опираться на результаты, касающиеся вероятности безусловного распределения обнаружить узел в заданном топологическом состоянии на полоске данной длины, а также первого момента этого распределения (т.е. типичной сложности узла).

4.1.1. Средняя сложность узла. Старшая степень n полиномиального инварианта характеризует сложность узла. Отметим, что в силу определения (1) и определения инварианта Кауффмана как статистической суммы старшая степень n имеет смысл свободной энергии. Для длинных полосок ($L_h \gg 1$) краевыми эффектами можно пренебречь, и старшая степень n должна быть пропорциональна общему числу пересечений, т.е. длине полоски. Данное утверждение непосредственно следует из аддитивности свободной энергии. В то же время для коротких полосок, когда длина полоски имеет порядок ее ширины, мы должны заметить отклонение от линейной зависимости из-за влияния краевых эффектов на топологическое состояние.

Сформулированные выше предположения замечательно подтверждаются численно.

Старшая степень полинома $n(L_h; p)$ для узла на полоске шириной $L_v = 5$ и результаты аппроксимации линейной функцией для концентраций примесей $p = 0.05$ и $p = 0.1$ показаны на рис. 2. Для каждого значения L_h усреднение производилось по 10×3000 конфигурациям примесей. Для вычисления погрешности производилось разбиение на 10 серий по 3000 конфигураций в каждой. Результаты аппроксимации численных данных линейной зависимостью для $L_h = 11 \div 61$ и $L_v = 3, 5$ приведены в табл. 1.

Таблица 1

$L_v = 3$		$L_v = 5$	
p	$n(L_h; p)$	p	$n(L_h; p)$
0.05	$0.0696(4) \times L_h - 0.4828(13)$	0.05	$0.1591(4) \times L_h - 1.053(14)$
0.1	$0.1381(4) \times L_h - 0.51(1)$	0.1	$0.3098(4) \times L_h - 1.094(16)$

Рис. 3. Вероятность образования тривиального узла $P_{tr}(p)$ на решетке $3 \times L_h$ для $L_h = 3, 5, 7$ (изображено линиями) и условная вероятность образования тривиального узла при условии, что узел длиной $L_t = 2L_h + 1$ – тривиальный (изображено значками), как функция концентрации примесей p .

4.1.2. Вероятность образования тривиального узла. На рис. 3 линиями показана безусловная вероятность образования тривиального узла $P_{tr}(p; L_h)$ как функция концентрации примесей p на полоске $3 \times L_h$ для значений $L_h = 3, 5, 7$. Усреднение производилось

Рис. 4. Вероятности образования тривиального узла $P_{\text{tr}}(L_h)$ на полоске шириной $L_v = 5$ и длиной $L_h = 3 \div 61$ для концентраций примесей $p = 0.05, 0.1$ и результаты аппроксимации.

Таблица 2

$L_v = 3$	
p	$P_{\text{tr}}(L_h; p)$
0.05	$1.049(4) \exp(-0.03720(15) \times L_h)$
0.1	$0.957(22) \exp(-0.0673(5) \times L_h)$

$L_v = 5$	
p	$P_{\text{tr}}(L_h; p)$
0.05	$1.155(7) \exp(-0.0794(3) \times L_h)$
0.1	$1.2305(22) \exp(-0.1568(11) \times L_h)$

по 10×10000 реализациям узлов. Из рис. 3 следует, что при промежуточных концентрациях $p \sim 0.5$ вероятность образования тривиального узла слабо зависит от p , а зависит основательно от L_h . В то же время на концах отрезка $p \simeq 0$ (и $p \simeq 1$) для каждого L_h существует линейная зависимость $P_{\text{tr}}(p; L_h)$ от p .

Вероятности P_{tr} образования тривиального узла на полоске шириной $L_v = 5$ при концентрациях примесей $p = 0.05, 0.1$ как функции $L_h = 3 \div 61$ показаны на рис. 4. Для каждого значения L_h усреднение производилось по 10×3000 конфигурациям примесей.

Масштаб по оси P_{tr} — логарифмический. Из рис. 4 видно, что зависимость вероятности генерации тривиального узла от длины полоски экспоненциальная. Результаты аппроксимации $P_{tr}(L_h; p)$ при $L_h \gg 1$ на полоске шириной $L_v = 5$ показаны на рис. 4 линиями. Численные данные приведены в табл. 2.

Из рис. 4 и табл. 2 следует, что безусловная вероятность случайного образования узла с нулевой старшей степенью полинома Кауффмана (т.е. узла, близкого к тривиальному) экспоненциально мала при достаточно больших длинах рассматриваемых полосок.

4.2. Условное распределение (“броуновский мост”). Изучим теперь корреляции топологического состояния разных участков узла. Рассмотрим узел в тривиальном топологическом состоянии, полученный в процессе случайной генерации решеточных узлов на полоске шириной L_v и длиной L_t . Отрежем от полоски часть, имеющую длину $0 < L_h < L_t$, и, замыкая свободные концы нитей, получим новый узел той же ширины L_v и меньшей длины L_h . Заметим, что все размеры решеток L_v, L_t, L_h нечетные. На рис. 1а показан пример исходного узла $L_v = 3, L_t = 5$. От него отрезана часть длины $L_h = 3$ (см. рис. 1б).

Нас интересует, как скажется на топологических свойствах нового квазиузла $L_v \times L_h$ то обстоятельство, что он является (с точностью до замыкания свободных концов нитей) частью тривиального узла $L_v \times L_t$. Ниже мы рассмотрим случаи $L_t = 3L_h$ и $L_t = 2L_h + 1$. Более конкретно, мы численно определим вероятность того, что полученный квазиузел тривиальный, а также найдем среднее значение его сложности *при условии, что он является частью тривиального узла*.

Рассматриваемая задача является типичной для теории случайных блужданий. В теории марковских цепей неоднократно исследовалась условная вероятность так называемого “броуновского моста”. Вопрос о статистических свойствах броуновского моста предполагает определение условной вероятности $P(\mathbf{x}, t \mid \mathbf{0}, T)$ того, что траектория случайного блуждания, начавшись в точке $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, в некоторый промежуточный момент времени $0 < t < T$ оказалась в точке $\mathbf{x}$ при условии, что в конечный момент времени T траектория вернулась в исходную точку $\mathbf{x} = \mathbf{0}$. Аналогичный вопрос был изучен для броуновского моста на графах свободных групп и пространствах постоянной отрицательной кривизны [16], [17], а также для произведений случайных матриц групп $PSL(2, \mathbb{Z})$ [18] и $PSL(n, \mathbb{Z})$ [19].

Исследуемая нами топологическая задача имеет естественную интерпретацию в терминах броуновского моста. Действительно, как было сказано выше (подробнее см. работы [13], [14]), старшая степень n инварианта Джонса–Кауффмана задает шкалу в пространстве разных топологических состояний узлов, позволяющую сравнивать узлы и говорить об их относительной “сложности” или “простоте”. Примем $n = 0$ за точку отсчета в фазовом пространстве топологических состояний и из множества Ω случайно генерированных узлов отберем подмножество $\Omega_{n=0}$ только таких, у которых $n = 0$. Теперь отрежем от каждого узла из подмножества $\Omega_{n=0}$ конечную часть (скажем, половину или треть, как в рассматриваемых нами случаях), замкнем свободные концы и исследуем распределение получившихся таким образом узлов по топологическим типам.

Именно такая ситуация качественно рассматривалась в работе [13], в которой на основе не вполне строгих соображений была сформулирована гипотеза о “складчатой глобуле”. Она сводилась к следующему утверждению: если весь узел целиком тривиален, то топологическое состояние любой конечной части такого узла близко к тривиальному. Ниже мы подтверждаем эту гипотезу непосредственным численным моделированием, формулируя ее в более строгих терминах.

4.2.1. Средняя сложность квазиузла. Проанализируем результаты вычислений для полосок шириной $L_v = 3, 5$. Концентрация “примесей” для всех случаев $p = 0.05$. Результаты получены усреднением по 3×10^4 отобраным тривиальным узлам.

На рис. 5 приведены данные для средней старшей степени $n(L_h)$ полинома на полосках $3 \times L_h$ при условиях, что а) узел на полоске длиной $L_t = 3L_h$ тривиальный (треугольники), б) узел на полоске длиной $L_t = 2L_h + 1$ тривиальный (квадраты). Для сравнения на рис. 5 показана средняя старшая степень полиномиального инварианта $n(L_h)$ узла на полоске $3 \times L_h$ (кресты). Аналогичные результаты для полоски шириной $L_v = 5$ при условии, что узел на полоске длиной $L_t = 2L_h + 1$ тривиальный, приведены на рис. 6.

Рис. 5. Средняя старшая степень полинома $n(L_h)$ узла на полосках шириной $L_v = 3$ и длиной $L_h = 3 \div 40$ для концентрации примесей $p = 0.05$ при условии, что узлы $L_t = 3L_h$ (треугольники) и $L_t = 2L_h + 1$ (квадраты) тривиальные. Для сравнения приведена средняя старшая степень полиномиального инварианта $n(L_h)$ узла на полоске $3 \times L_h$ (кресты).

Сравним данные для старшей степени броуновского моста n (треугольники, квадраты) с “безусловной сложностью” случайно генерированного узла на полоске длиной L_h (кресты) (см. рис. 5). Аналогичные данные для полоски шириной $L_v = 5$ представлены на рис. 2 и рис. 6. Легко заметить, что типичная сложность узла, являющегося частью тривиального, существенно меньше, чем типичная сложность “безусловного узла”. Ка-

Рис. 6. Средняя старшая степень полинома $n(L_h)$ узла на полоске шириной $L_v = 5$ и длиной L_h для концентрации примесей $p = 0.05$ при условии, что узел $L_t = 2L_h + 1$ тривиальный (треугольники). Для сравнения приведена средняя старшая степень полиномиального инварианта $n(L_h)$ узла на полоске $5 \times L_h$ (кресты).

чественные соображения, которые могут служить объяснением наблюдаемого явления, изложены в разделе 5.

4.2.2. Вероятность тривиального квазиузла. Нас интересует, какова вероятность того, что решеточный узел на полоске шириной L_v и длиной L_h тривиален при условии, что он является (с точностью до замыкания нитей) частью случайно генерированного тривиального узла на полоске длиной $L_t > L_h$.

На рис. 3 приведены результаты расчета условной вероятности того, что квазиузел длиной L_h тривиален *при условии*, что он является частью тривиального узла на полоске длиной $L_t = 2L_h + 1$. Данные для решеток длиной $L_h = 3, 5, 7$ обозначены соответственно крестами, квадратиками и треугольниками с пометкой “усл”. На этом же рисунке линиями изображены данные для безусловных вероятностей образования тривиального узла на полосках длиной $L_h = 3, 5, 7$ (см. выше п. 4.1.2).

Как мы и ожидали, вероятность того, что узел тривиален при дополнительном условии, что он является частью большего тривиального узла, оказалась существенно выше, чем безусловная вероятность образования тривиального узла на полоске.

4.3. Связь между старшей степенью инварианта узла и логарифмом старшего собственного значения трансфер-матрицы для полоски $3 \times L_h$. В дальнейшем для иллюстрации свойств распределения старшей степени инварианта Джонса–Кауффмана случайно генерированных узлов на полоске мы используем некоторые свойства произведения случайных матриц. В связи с этим рассмотрим связь старшей степени полиномиального инварианта узла на полоске $3 \times L_h$ с показателем старшего

собственного значения матрицы A , полученной произведением трансфер-матриц. Решетка Поттса 3×5 (рис. 1в) приводится к виду 2×6 (рис. 1г). Поэтому для узла на решетке $3 \times L_h$ матрица A имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где элементы a_{11} , a_{12} , a_{21} , a_{22} являются полиномами переменной x . В этом случае инвариант узла выражается через элементы матрицы A следующим образом:

$$n = (1+x)^{-N_p-1} (-\sqrt{x})^{N_p+1+N_b} [(x+x^{-1}+2)a_{12} + (x+x^{-1}+2)^2 a_{22}]. \quad (9)$$

Старшее собственное значение матрицы A определяется выражением

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[a_{11} + a_{22} + \sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})} \right]. \quad (10)$$

Рассмотрим показатель старшего собственного значения $n_\lambda = \ln \lambda / \ln x$ при $x \rightarrow \infty$. Пусть n_{11} , n_{12} , n_{21} , n_{22} суть старшие показатели полиномов a_{11} , a_{12} , a_{21} , a_{22} , соответственно. Учтем, что старший показатель произведения полиномов равен сумме старших показателей полиномов. Примем во внимание следующие возможные варианты:

- 1) $\max(n_{11}, n_{22}) > (n_{12} + n_{21})/2$, тогда $n_\lambda = \max(n_{11}, n_{22})$;
- 2) $\max(n_{11}, n_{22}) < (n_{12} + n_{21})/2$, тогда $n_\lambda = (n_{12} + n_{21})/2$;
- 3) $\max(n_{11}, n_{22}) = (n_{12} + n_{21})/2$ и не существует полинома a_x такого, что $a_x^2 = (a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})$, в этом случае все равно $n_\lambda = \max(n_{11}, n_{22})$;
- 4) $\max(n_{11}, n_{22}) = (n_{12} + n_{21})/2$. Если существует полином a_x такой, что $a_x^2 = (a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})$ и старшая степень полинома $a_{11} + a_{22} + a_x$ равна $\max(n_{11}, n_{22})$, то $n_\lambda = \max(n_{11}, n_{22})$;
- 5) $\max(n_{11}, n_{22}) = (n_{12} + n_{21})/2$. Если существует полином a_x такой, что $a_x^2 = (a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})$ и старшая степень полинома $a_{11} + a_{22} + a_x$ меньше $\max(n_{11}, n_{22})$, то $n_\lambda < \max(n_{11}, n_{22})$.

Для случаев 1–4 получаем $n_\lambda = \max(n_{11}, n_{22}, (n_{12} + n_{21})/2)$. Заметим, что случай 5 возможен, например, если $a_{11} = -x$, $a_{12} = a_{21} = a_{22} = 0$, однако вероятность такого события экспоненциально мала.

ЗАМЕЧАНИЕ. В выражение для полиномиального инварианта входит множитель $d = (1+x)^{-N_p-1} (-\sqrt{x})^{N_p+1+N_b}$, где $N_p = (L_v+1)(L_h+1)/2$ – число спинов Поттса, а $N_b = \sum_{i,j} b_{i,j}$ – сумма по всем переменным $b_{i,j}$, задающим беспорядок на решетке Поттса. Поскольку мы будем сравнивать старший показатель полиномиального инварианта n с собственным значением n_λ , то добавим $\ln d / \ln x$ к старшей степени n_λ и в дальнейшем будем приводить результаты для $\tilde{n}_\lambda = n_\lambda - (N_p+1-N_b)/2$. Для узла на полоске длиной $L_h = 20 \div 60$ численные результаты для $\tilde{n}_\lambda(L_h)$ отлично аппроксимируются линейной зависимостью

$$\tilde{n}_\lambda(L_h) = -1.16(2) + 0.0741(6)L_h. \quad (11)$$

Рис. 7. Сравнение старшей степени полиномиального инварианта n и старшего показателя наибольшего собственного значения произведения трансфер-матриц $\tilde{n}_\lambda$ для броуновского моста при $L_t = 3L_h$ и $L_t = 2L_h + 1$. Штрих-пунктирной кривой показана аппроксимация $\tilde{n}_\lambda$ для $L_t = 2L_h + 1$.

Этот результат соответствует линейной зависимости старшего показателя полиномиального инварианта n от L_h .

Мы также численно исследовали зависимости $\tilde{n}_\lambda(L_h)$ для броуновского моста $L_t = 3L_h$ и $L_t = 2L_h + 1$, которые показаны на рис. 7. Там же представлен результат аппроксимации этой величины для $L_t = 2L_h + 1$ степенной функцией

$$\tilde{n}_\lambda(L_h) = -1.74(3) + 0.300(22)L_h^{0.498(16)}. \quad (12)$$

Мы видим, что в случае броуновского моста старший показатель максимального собственного значения произведения трансфер-матриц имеет корневую зависимость от L_h . Более подробно этот результат будет обсужден ниже в п. 5.1 и 5.2.

Изучим корреляцию старшей степени полиномиального инварианта n и показателя собственного значения матрицы $\tilde{n}_\lambda$. Определим коэффициент корреляции

$$\text{corr}(n, \tilde{n}_\lambda) = \frac{\langle n\tilde{n}_\lambda \rangle - \langle n \rangle \langle \tilde{n}_\lambda \rangle}{\sqrt{(\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2)(\langle \tilde{n}_\lambda^2 \rangle - \langle \tilde{n}_\lambda \rangle^2)}}. \quad (13)$$

При больших L_h разность $1 - \text{corr}(n, \tilde{n}_\lambda)$ хорошо аппроксимируется зависимостью $2, 7 \cdot L_h^{-1}$ (см. рис. 8). Таким образом, при $L_h \gg 1$ n и $\tilde{n}_\lambda$ оказываются скоррелированными.

Напомним, что полиномиальный инвариант для полосы с $L_v = 3$ задается формулой (9). Подробный вывод (9) дан в работе [14]. Там же показано, что полиномиальный инвариант Джонса–Кауффмана $K(x)$ узла на полоске соответствует статистической сумме модели Поттса со специфическим выбором параметров $e^{-\beta J_{i,j}} = -x^{b_{i,j}}$ и $q = x + x^{-1} + 2$, где x – переменная полинома Джонса, J – константа связи, β – обратная температура, q – число состояний спина Поттса. Ферро- и антиферромагнитные

Рис. 8. Разность между единицей и коэффициентом корреляции $\text{corr}(n, \tilde{n}_\lambda)$ (треугольники) как функция L_h для $p = 0.1$ и ее аппроксимация (сплошная кривая).

примеси на связях модели Поттса специфическим образом (2) связаны с “проходами” и “переходами” в соответствующих пересечениях нитей в узле. Пример решетки Поттса, соответствующей тривиальному узлу 3×5 , приведен на рис. 1г. Ферромагнитным связям между спинами соответствуют сплошные линии, антиферромагнитным – штриховые. Для решетки шириной $L_v = 3$ число спинов Поттса $N_p = 2(L_h + 1)$, а N_b – разница между числом ферромагнитных и антиферромагнитных связей. В выражении (9) a_{21} и a_{22} – элементы последнего столбца (2×2) -матрицы A , соответствующей распределению пересечений для данного узла, а следовательно, ферромагнитных и антиферромагнитных связей на соответствующей (дуальной) решетке Поттса.

Опишем построение матрицы A для полосы с $L_v = 3$. Сопоставим горизонтальной ферромагнитной (f) связи трансфер-матрицу P , горизонтальной антиферромагнитной (а) связи сопоставим трансфер-матрицу P^* , “косой” f-связи сопоставим трансфер-матрицу R , “косой” а-связи – трансфер-матрицу R^* (подробно способ построения этих матриц описан в работе [14]),

$$\begin{aligned} P &= (1+x)x^{-1/2} \begin{pmatrix} -x^{1/2} & 0 \\ (1+x)^{-1}x^{1/2} & x^{-1/2} \end{pmatrix}, \\ R &= x^{1/2} \begin{pmatrix} -x^{1/2} & -(x+1)x^{-1/2} \\ 0 & x^{-1/2} \end{pmatrix}, \\ P^* &= (1+x)x^{-1/2} \begin{pmatrix} -x^{-1/2} & 0 \\ (1+x)^{-1}x^{1/2} & x^{1/2} \end{pmatrix}, \\ R^* &= x^{1/2} \begin{pmatrix} -x^{-1/2} & -(x^{-1}+1)x^{-1/2} \\ 0 & x^{1/2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{14}$$

Соответствие вышеприведенных трансфер-матриц f- и а-связям на решетке показано на рис. 1д. Следует заметить, что для узла на решетке $3 \times L_h$, которому соответствует

модель Поттса на полоске шириной 2, верхней и нижней f-связи соответствует одна и та же матрица P (или P^* для a-связи). Для узлов на полосках бóльшей ширины это не так. Результирующее произведение трансфер-матриц – матрица A , соответствующая решетке, изображенной на рис. 1г, – выглядит следующим образом:

$$A = PR^*PP^*RP^*PR^*PPR^*PP^*RP^*. \quad (15)$$

Каждому изменению расположения пересекающихся нитей отвечает изменение типа связи: f-связь заменяется на a-связь или наоборот. Соответственно происходит изменение элемента трансфер-матрицы для этой связи (например, $P \rightarrow P^*$ для горизонтальной связи или $R^* \rightarrow R$ для “косой” связи). Заметим также, что при этом надо учесть изменение параметра N_b , характеризующего соотношение числа ферромагнитных и антиферромагнитных связей. Трансфер-матрицы P^* и R^* являются обратными к матрицам P и R с точностью до общих множителей вида $x^k(1+x)^m$.

Как легко заметить, в выражении (15), отвечающем тривиальному узлу, матрицы P и обратные к ним P^* стоят рядом. При перемножении они дают единичную матрицу (с точностью до множителей вида $x^k(1+x)^m$), в результате чего рядом оказываются трансфер-матрицы R и R^* , которые также взаимно сокращаются. После ряда последовательных сокращений мы получаем матрицу A , которая с точностью до численного множителя совпадает с R . При наличии примесей рядом могут оказаться, например, две трансфер-матрицы P , которые не сокращаются, и это приводит к полиномиальному инварианту, отличному от единицы. Таким образом, проблему вычисления вероятности узла заданного топологического типа (в том числе и тривиального узла) можно рассматривать на языке сокращения слов, записанных в алфавите “букв” – трансфер-матриц P, P^*, R, R^* с определенными коммутационными соотношениями.

Мы не будем далее исследовать структуру группы, порожденной матрицами P, P^*, R и R^* , а заметим только, что, во-первых, коммутатор $[P, R] \equiv PR - RP$ является матрицей, а не c -числом, и во-вторых, качественные оценки для математического ожидания случайного блуждания на этой группе могут быть получены из анализа вероятностных распределений для марковских цепей на гиперболических группах [20].

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

5.1. Броуновский мост на плоскости Лобачевского и произведение некоммутующих случайных матриц. Как мы установили в предыдущем разделе, существует корреляция между средней старшей степенью n инварианта Джонса–Кауффмана случайного узла и показателем Ляпунова (т.е. усредненного логарифма старшего собственного значения) трансфер-матрицы, представляющей тот же узел. Поэтому, исследуя условные распределения узлов по топологическим типам, вместо изучения распределения степени n алгебраического инварианта можно изучать распределения показателя Ляпунова случайных матриц при условии броуновского моста.

В качестве иллюстрации рассмотрим предельное распределение показателя Ляпунова первых m матриц в произведении N случайных унимодулярных матриц 2×2 при условии, что произведение как целое равно единичной матрице, т.е. при условии

броуновского моста. Строгий анализ данной проблемы дан в статье [16]. Ниже мы ограничимся качественными соображениями, которые дают более наглядное представление о рассматриваемой задаче.

Задача о броуновском мосте для марковской цепи из N одинаково распределенных некоммутирующих случайных матриц может быть переформулирована в терминах случайного блуждания в пространстве постоянной отрицательной кривизны (пространстве Лобачевского). Известно [16], [17], [19], что условие броуновского моста, т.е. возвращение траектории в исходную точку в пространстве Лобачевского, устраняет влияние кривизны, превращая соответствующую предельную функцию распределения в обычную гауссову с нулевым средним. Этот факт легко проиллюстрировать следующим простым вычислением.

Вероятность того, что случайное блуждание, начавшееся в точке $\mu = 0$, в момент времени t окажется в *определенной* точке, расположенной на расстоянии μ в пространстве постоянной отрицательной кривизны $\lambda = -1$ (т.е. в пространстве Лобачевского) с метрикой $ds^2 = d\mu^2 + \text{sh}^2 \mu d\Phi^2$ (где $d\Phi^2$ – квадрат приращения длины в пространстве углов), имеет вид

$$P(\mu, t) = \frac{e^{-t}}{8\sqrt{(\pi t)^3}} \frac{\mu}{\text{sh} \mu} \exp\left(-\frac{\mu^2}{4t}\right) \quad (16)$$

(мы положили коэффициент диффузии $D = 1$). Впервые это сферически-симметричное решение для случайного блуждания в пространстве Лобачевского был получено в работах [21].

Соответственно вероятность найти конечную точку случайного блуждания в момент времени t в *произвольном* месте пространства Лобачевского на расстоянии μ от исходной точки есть

$$\mathcal{P}(\mu, t) = P(\mu, t) \mathcal{N}_s(\mu), \quad (17)$$

где $\mathcal{N}_s(\mu) = \text{sh}^2 \mu$ – площадь сферы радиуса μ в пространстве Лобачевского.

Различие между функциями распределения P и $\mathcal{P}$ несущественно в пространстве с евклидовой метрикой, в то время как в неевклидовой геометрии это различие становится принципиальным. Используя определение броуновского моста, вычислим вероятности того, что случайное блуждание из N шагов, начавшееся и закончившееся в точке $\mu = 0$, попало после первых t шагов в некоторую точку на расстоянии μ от начала в пространстве Лобачевского. Эта вероятность при $N \rightarrow \infty$ определяется формулой

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mu, t | 0, N) &= \frac{P(\mu, t) P(\mu, N-t) \text{sh}^2 \mu}{P(0, t)} = \\ &= \frac{N^{3/2}}{8\pi t^{3/2} (N-t)^{3/2}} \mu^2 \exp\left\{-\frac{\mu^2}{4} \left(\frac{1}{t} + \frac{1}{N-t}\right)\right\}. \end{aligned} \quad (18)$$

В результате мы получаем гауссову функцию распределения с нулевым средним.

Выражение (18), описывающее случайный процесс на римановой поверхности постоянной отрицательной кривизны, имеет прямое отношение к условным распределениям

показателей Ляпунова произведения некоммутирующих матриц. Известно, что пространство Лобачевского H может быть идентифицировано с некоммутативной группой $SL(2, \mathbb{C})/SO(3)$. Эта связь позволяет нам разрешить (по крайней мере, качественно) следующую проблему. Возьмем броуновский мост на группе $\mathcal{H} = SL(2, \mathbb{C})/SO(3)$, т.е. потребуем, чтобы произведение N независимых случайных матриц $\widehat{\mathcal{M}}_k \in \mathcal{H}$ ($0 \leq k \leq N$) было идентично единичной матрице. Рассмотрим предельное распределение показателей Ляпунова $\hat{\delta}$ для первых m матриц в произведении. Для того чтобы получить полное соответствие данной проблемы случайному блужданию в пространстве Лобачевского, напомним соответствующее стохастическое рекуррентное уравнение для некоторого вектора $\mathbf{W}_k = \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$:

$$\mathbf{W}_{k+1} = \widehat{\mathcal{M}}_k \mathbf{W}_k, \quad \mathbf{W}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

где $\mathcal{M}_k \in \mathcal{H}$ для всех $k \in [0, N]$. Условие броуновского моста означает, что

$$\mathbf{W}_N = \mathbf{W}_0 \quad \text{для} \quad N \gg 1. \quad (20)$$

Рассмотрим простейший случай

$$\widehat{\mathcal{M}}_k = 1 + \widehat{M}_k, \quad (21)$$

где норма матрицы $\widehat{M}_k$ много меньше единицы. В этом случае дискретное динамическое уравнение (19) может быть заменено дифференциальным. Его стационарное распределение определяется соответствующим уравнением Фоккера–Планка для случайного блуждания в пространстве Лобачевского. Показатель Ляпунова $\hat{\delta}$ произведения случайных матриц $\widehat{\mathcal{M}}$ совпадает с длиной геодезической в пространстве Лобачевского. Следовательно, при условиях (20), (21) мы имеем для $\hat{\delta}$ обычное распределение Гаусса, совпадающее с уравнением (18).

5.2. Выводы. Несмотря на то что приведенное выше рассмотрение довольно схематично и относится к специально выбранной группе некоммутирующих матриц, оно ясно отражает основной результат, наблюдаемый в наших непосредственных численных экспериментах. Показатель Ляпунова δ первых $m = cN$ ($0 < c < 1$) матриц броуновского моста из N некоммутирующих матриц с компактным носителем (т.е. матриц, элементы которых распределены на конечном отрезке) при $N \gg 1$ имеет асимптотику (см. (12)) $\delta \sim \sqrt{N}$. Без условия броуновского моста (т.е. для “открытых” случайных путей) мы воспроизводим стандартный результат Фюрстенберга [22] $\delta \sim N$.

Данное утверждение может быть легко переформулировано в топологических терминах для задачи, рассматриваемой в нашей работе. Как показано в п. 4.3, коррелятор $\text{corr}(n, \tilde{n}_\lambda)$ стремится к единице по мере роста L_h . Отсюда мы можем сделать вывод, что типичная старшая степень n топологического инварианта Джонса (или Кауффмана) квазиузла, полученного отрезанием любой конечной части тривиального узла объема $N = L_h \times L_v$, при $N \gg 1$ имеет асимптотику

$$n \sim \sqrt{N} \sim \sqrt{L_h},$$

поскольку $L_v = \text{const}$. Без условия броуновского моста асимптотика типичной степени n случайно генерированного узла есть $n \sim N \sim L_h$ (см., например, [14]), что согласуется с теоремой Фюрстенберга [22].

Таким образом, относительная сложность n/N любого квазиузла, полученного отрезанием конечной части тривиального узла, стремится к нулю:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\text{const} \sqrt{N}}{N} = 0.$$

Рис. 3 и 5 хорошо согласуются с вышеизложенными теоретическими соображениями. Действительно, средняя сложность квазиузла, являющегося частью тривиального, оказывается существенно меньше, чем безусловная сложность узла того же объема (см. рис. 5). Соответственно вероятность того, что часть тривиального узла будет также тривиальной, оказывается существенно выше, чем безусловная вероятность образования тривиального узла того же объема (см. рис. 3).

Тем самым мы непосредственно подтверждаем гипотезу о том, что в случайно генерированных тривиальных плотных узлах и соответственно в складчатой глобуле траектория нити практически незаузлена на любом конечном участке. Единственно возможным способом плотной укладки нити, удовлетворяющим вышеозначенному условию незаузленности, является самоподобная структура, похожая в среднем на кривую Пеано [5].

В заключение мы хотели бы отметить, что проведенный выше анализ топологии плотных незаузленных траекторий является косвенным подтверждением гипотезы, высказанной ранее в работах [23] относительно возможности переформулировки некоторых статистико-топологических проблем для сильно сколлапсированных полимерных цепей в терминах интеграла по путям с заданной фрактальной размерностью *без явного задания топологических характеристик*. А именно, в ансамбле сильно сколлапсированных незаузленных нитей наибольшая доля из них имеет фрактальную размерность максимально плотной упаковки на всех масштабах $D_f = d$, где d – размерность пространства. Таким образом, есть основания полагать и обратное: почти все пути в ансамбле траекторий с фрактальной размерностью $D_f = d$ ($d \leq 3$) топологически изоморфны узлу, близкому к тривиальному.

Напомним, что функция распределения для замкнутой полимерной цепи с топологическими ограничениями может быть представлена в виде интеграла по множеству Ω замкнутых путей с фиксированным значением топологического инварианта

$$Z = \int_{\Omega} D_{\omega}\{r\} e^{-H} = \int \dots \int D_{\omega}\{r\} e^{-H} \delta[n], \quad (22)$$

где $D_{\omega}\{r\}$ означает интегрирование с обычной мерой Винера и $\delta[n]$ вырезает пути с заданным значением старшей степени топологического инварианта Джонса–Кауффмана ($n = 0$ соответствует тривиальным узлам).

Если наше соображение верно, то интегрирование по Ω в формуле (22) для цепей в глобулярной фазе может быть заменено интегрированием по всем путям без каких-либо

ограничений (как топологических, так и стерических), но со специальной новой мерой $D_f\{r\}$:

$$Z = \int \cdots \int D_f\{r\} e^{-H}. \quad (23)$$

Обычная мера Винера $D_\omega\{r\}$ сконцентрирована на траекториях с фрактальной размерностью $D_f = 2$. Мы предполагаем, что для описания статистики кольцевых незаузленных цепей должна использоваться мера $D_f\{r\}$ с фрактальной размерностью $D_f = d$ ($d \leq 3$).

Благодарности. Данная работа частично поддержана грантом РФФИ № 00-15-99302. Один из авторов (О. А. Васильев) выражает благодарность Е. А. Кузнецову за полезные замечания. Большую помощь нам оказал Ж. Якобсен, дав консультации по реализации численного алгоритма, используемого в данной работе. Авторы благодарят Межотраслевой Суперкомпьютерный Центр за предоставленные вычислительные ресурсы.

Список литературы

- [1] И. М. Лифшиц. ЖЭТФ. 1968. Т. 55. С. 2408.
- [2] I. M. Lifshits, A. Yu. Grosberg, A. R. Khokhlov. Rev. Mod. Phys. 1978. V. 50. P. 683.
- [3] А. Ю. Гросберг, А. Р. Хохлов. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989.
- [4] А. Ю. Гросберг, С. К. Нечаев, Е. И. Шахнович. J. Phys. (Paris). 1988. V. 49. P. 2095.
- [5] B. B. Mandelbrot. The Fractal Geometry of Nature. San Francisco: Freeman, 1982.
- [6] B. Chu, Q. Ying, A. Grosberg. Macromolecules. 1995. V. 28. P. 180.
- [7] A. R. Khokhlov, S. K. Nechaev. J. Phys. II (Paris). 1996. V. 6. P. 1547.
- [8] A. Yu. Grosberg, S. K. Nechaev. Macromolecules. 1991. V. 24. P. 2789.
- [9] J. Ma, J. E. Straub, E. I. Shakhnovich. J. Chem. Phys. 1995. V. 103. P. 2615.
- [10] V. F. R. Jones. Bull. Am. Math. Soc. 1985. V. 12. P. 103.
- [11] L. H. Kauffman. Topology. 1987. V. 26. P. 395.
- [12] F. Y. Wu. J. Knot. Theory Ramific. 1992. V. 1. P. 47.
- [13] А. Ю. Гросберг, С. Нечаев. J. Phys. A. 1992. V. 25. P. 4659; Europhys. Lett. 1992. V. 20. P. 603.
- [14] О. А. Васильев, С. К. Нечаев. ЖЭТФ. 2001. Т. 120. С. 1288.
- [15] И. М. Лифшиц, А. Ю. Гросберг. ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 2399.
- [16] Л. Б. Коралов, С. К. Нечаев, Я. Г. Синай. Теория вероятн. и ее примен. 1993. Т. 38. С. 331.
- [17] P. Bougerol. Probab. Theory Relat. Fields. 1988. V. 78. P. 193.
- [18] S. Nechaev, Ya. G. Sinai. Bol. Soc. Bras. Mat. Nova Sér. 1991. V. 21. P. 121.
- [19] А. В. Летчиков. УМН. 1996. Т. 51. № 1. С. 51.
- [20] A. Comtet, S. Nechaev, R. Voituriez. J. Stat. Phys. 2001. V. 102. P. 203.
- [21] М. Е. Герценштейн, В. Б. Васильев. Теория вероятн. и ее примен. 1959. Т. 4. С. 424; Ф. И. Карпелевич, В. Н. Тутубалин, М. Г. Шур. Теория вероятн. и ее примен. 1959. Т. 4. С. 432.
- [22] H. Fürstenberg. Trans. Am. Math. Soc. 1963. V. 198. P. 377; В. Н. Тутубалин. Теория вероятн. и ее примен. 1965. Т. 10. С. 15; 1968. Т. 13. С. 63.
- [23] А. Ю. Гросберг, С. К. Нечаев. Adv. Polym. Sci. 1993. V. 106. P. 1; S. K. Nechaev. Statistics of Knots and Entangled Random Walks. Singapore: World Scientific, 1996.

Поступила в редакцию 14.11.2002 г.