二聚覆盖问题简介

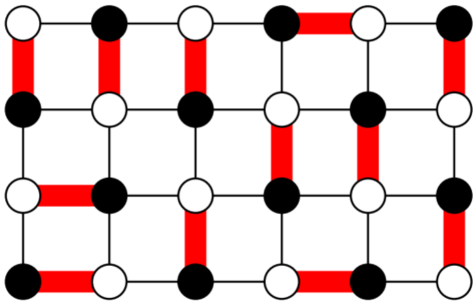
二聚覆盖问题主要研究二聚体(dimer)在晶体状面(crystalline substrate)上的完美覆盖数. 统计物理中, 该指标可反应系统的熵, 自由能等统计量. 例如, 设$Z_{m,n}$为采用二聚方体覆盖$m\times n$棋盘面的完美覆盖总数, 则依照自由能之定义, 极限

$$-\lim_{m,n\to\infty}\frac{1}{mn}\log Z_{m,n}$$

存在. 实际上, [P.W.Kasteleyn]早在1961年提出了组合学解法([论文地址]), 其分析方法大致如下:

$m\times n$棋盘上的二聚覆盖问题

不妨设m为偶数, 下研究$m\times n$棋盘上的二聚覆盖总数. 不失一般性地, 可转化问题为$m\times n$格点图的perfect matching计数. 下图为4×6棋盘图(记作$G_{4,6}$)对应的二聚覆盖图.



记$E'\subset E(G_{4,6})$为某一二聚覆盖, 则该覆盖的Boltzman权为

$$w(E'):=\prod_{e\subset E'}w(e).$$

其中$w(e)$为边e的权重. 定义覆盖总权为

$$w(G)=\sum_{E'\text{ covers }G}w(E').$$

若能够$w(E')$恒为1, 则$w(G)$为图G的二聚覆盖总数.

Step I: 定义Kasteleyn矩阵, 选择图定向

沿着所有平行于对角线的方向将点黑白染色($G_{m,n}$为二分图), 则白点数量为$N:=\dfrac{nm}{2}$. 记$\{W_1,W_2,\ldots,W_N\}$为白点集, $\{B_1,B_2,\ldots,B_N\}$为黑点集. 对每一个定向, 都可如下定义Kasteleyn矩阵$K_{N\times N}$:

$$k_{ij}=\begin{cases} w(W_i,B_j) & W_i\to B_j,\\ -w(W_i,B_j) & W_i\leftarrow B_j,\\ 0 & \text{else.}\end{cases}$$

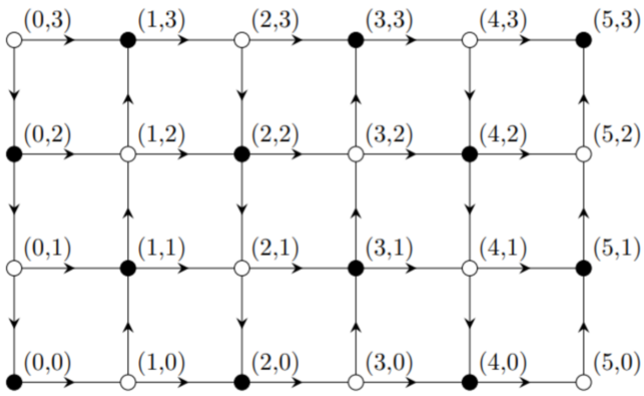
注意到

$$\det K=\sum_{\sigma\in S_N}\operatorname{sgn}(\sigma)\prod_{i=1}^{N}k_{i,\sigma(i)}.$$

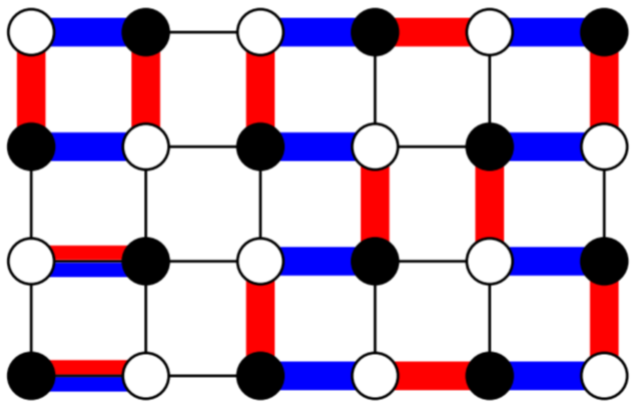
以及E'为二聚覆盖时, 存在σ使得$E'=\{(W_i,B_{\sigma(i)})\}$. 从而只需找到合适的定向使得$w(G)=|\det K|$, 即对任意覆盖$E_1'$与$E_2'$, 对应$\sigma_1$与$\sigma_2$, 有

$$\mathrm{sgn}(\sigma_1)\prod_{i=1}^{N} k_{i,\sigma_1(i)} = \mathrm{sgn}(\sigma_2)\prod_{i=1}^{N} k_{i,\sigma_2(i)}.$$

为计算之便, 记所有边无权(推广解时, 会将横边与纵边赋予不同的权重). 考虑如图所示的定向



以及任意两组二聚覆盖



下证明$\mathrm{sgn}(\sigma_1\cdot\sigma_2)\prod_{i=1}^{N} k_{i,\sigma_1(i)}k_{i,\sigma_2(i)} \equiv 1.$

- 对E_1'与E_2'的中相交的二重边, 显然k之积为1, 同时两置换在此二重边之局上同号.
- 对红蓝交错的长为$2l$的圈而言, $\sigma_1^{-1}\circ\sigma_2$实则一次轮换, 从而$\mathrm{sgn}(\sigma_1\cdot\sigma_2)=(-1)^{l+1}$. 注意到$C_4$中, 两种染色中对应的$B\to W$之边数量改变了$\pm 1$. 从而归纳知长为$2l$的圈中$B\to W$之数量改变了

$$\sum_{i}^{l-1}\pm 1 \equiv l-1 \mod 2.$$

  故在长为$2l$的圈中(不妨记顶点为$1,\ldots,2l$)

$$\mathrm{sgn}(\sigma_1\cdot\sigma_2)\prod_{i=1}^{2l} k_{i,\sigma_1(i)}k_{i,\sigma_2(i)} = (-1)^{l+1}(-1)^{l-1}\equiv 1.$$

故该定向合理.

Step II: 计算$\det K$

不妨设$G_{m,n}$中的点具有形式(x,y), 其中$1\le x\le m$且$1\le y\le n$, 则

$$K_{(x_1,y_1),(x_2,y_2)} = (\delta_{x'}^{x+1}-\delta_{x'}^{x-1})\delta_y^{y'} + (-1)^x\delta_x^{x'}(\delta_{y'}^{y+1}-\delta_{y'}^{y-1}).$$

注意到K为"半边矩阵", 即K行数为$G_{m,n}$总顶点数之一半, 可补全K为$A(G_{m,n})$. 记$Q_{m\times m}=(-1)^x(\delta_{x'}^{x+1}-\delta_{x'}^{x-1})$, $R_{n\times n}=(\delta_{y'}^{y+1}-\delta_{y'}^{y-1})$, $S_{m\times m}=\mathrm{diag}((-1)^x)$. 则

$$\tilde{K}:=(S\otimes\mathbf{1}_n)(Q\otimes\mathbf{1}_n+\mathbf{1}_m\otimes R).$$

对于边加权之情形(如横向边权为z_1, 纵向边权为z_2)有

$$\tilde{K}:=(S\otimes\mathbf{1}_n)(z_1Q\otimes\mathbf{1}_n+z_2\mathbf{1}_m\otimes R).$$

对三对角矩阵

$$R=\begin{pmatrix}0&1&&\\-1&0&\ddots&\\&\ddots&\ddots&1\\&&-1&0\end{pmatrix}$$

数学归纳法知, R的递推式满足Чебышёв多项式, 故特征值为$\{2i\cos(\pi k/(n+1))\}_{k=1}^n$. 同理, Q的特征值为$\{2\cos(\pi k/(m+1))\}_{k=1}^m$. 故

$$\begin{aligned}|\det K|^2&=|\det\tilde{K}|\\&=\sqrt{|\det(S\otimes I_n)|\cdot|\det(z_1Q\otimes I_n+z_2I_m\otimes R)|}\\&=\sqrt{\prod_{k=1}^m\prod_{l=1}^n\left(z_1\cdot 2i\cos\frac{\pi k}{n+1}+z_2\cdot\cos\frac{\pi l}{m+1}\right)}\\&=2^{mn}\prod_{l=1}^n\prod_{k=1}^{m/2}\left[(z_1\cos\frac{\pi k}{m+1})^2+(z_2\cos\frac{\pi l}{n+1})^2\right]\end{aligned}$$

平均覆盖类数之极限

我们自然关心$Z_{m,n}(z_1,z_2)$与m,n的关系. 据物理学背景, 平均自由能

$$f(z_1,z_2):=-\min_{m,n\to\infty}\frac{1}{mn}\log Z_{mn}(z_1,z_2)$$

应为某一常数. 据二重黎曼积分之定义,

$$\begin{aligned}f(z_1,z_2)&=-\lim_{m,n\to\infty}\frac{\log 2^{mn/2}}{mn}\log\prod_{p=1}^n\prod_{q=1}^{m/2}\sqrt{(z_1\cos\frac{\pi q}{m+1})^2+(z_2\cos\frac{\pi p}{n+1})^2}\\&=-\frac{1}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta\int_0^{\pi/2}\log[4(z_1^2\cos^2\theta+z_2^2\cos^2\phi)]\mathrm{d}\phi\\&=-\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta\left[\frac{1}{2}\log^2(2z_2\cos\theta)+\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\log\left(1+\frac{\cos^2\phi}{(\frac{z_2}{z_1})^2\cos^2\theta}\right)\mathrm{d}\phi\right]\\&=-\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta\left[\log(2z_2\cos\theta)+\log\frac{1+\sqrt{1+\frac{z_1^2}{z_2^2\cos^2\theta}}}{2}\right]\\&=-\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta(\log z_1+\log(\frac{z_2}{z_1}\cos\theta+\sqrt{1+(\frac{z_2}{z_1})^2\cos^2\theta})\\&=-\frac{1}{2}\log z_1-\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}g(\frac{z_2}{z_1}\cos\theta)\mathrm{d}\theta\end{aligned}$$

其中

$$g(x)=\log(x+\sqrt{1+x^2})=\sum_{j=0}^{\infty}\binom{2j}{j}\frac{(-1)^j}{(2j+1)2^{2j}}x^{2j+1}.$$

故

$$\begin{aligned}\int_0^{\pi/2}g(\cos\theta)\mathrm{d}\theta&=\sum_{j=0}^{\infty}\int_0^{\pi/2}\binom{2j}{j}\frac{(-1)^j(z_2/z_1)^{2j+1}}{(2j+1)2^{2j}}\cos^{2j+1}\theta\mathrm{d}\theta\\&=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-1)^j}{(2j+1)^2}(z_2/z_1)^{2j+1}\\&=\int_0^{z_1/z_1}\frac{\arctan t}{t}\mathrm{d}t\end{aligned}$$

特殊地, 令$z_1=z_2=1$, 则

$$f(1,1)=-\frac{1}{\pi}\int_0^1\frac{\arctan t}{t}\mathrm{d}t=-\frac{G}{\pi}$$

其中G为Catalan常数. 一般地, 有

$$f(z_1,z_2)=\frac{1}{2}\log z_1+\frac{1}{\pi}\mathrm{Ti}_2(z_2/z_1).$$

其中$\mathrm{Ti}_2(\mathrm{z}):=\sum_{k\geq 1}(-1)^{k-1}\frac{x^{2k-1}}{(2k-1)^2}$为反正切函数.