

К. С. Рядовкин

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВЕТВЯЩИХСЯ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДЕНИЙ НА НЕКОТОРЫХ ДВУМЕРНЫХ РЕШЕТКАХ

§1. ВВЕДЕНИЕ

В работах [3, 4] было показано, что спектральный анализ дискретных периодических операторов на решетке \mathbf{Z}^d является важным и полезным инструментом для решения уже вероятностной задачи – изучения асимптотического поведения ветвящегося случайного блуждания с непрерывным временем на \mathbf{Z}^d . Результаты об асимптотическом поведении ветвящегося случайного блуждания с конечным числом источников ветвления можно найти в [3, 4] и упомянутых там работах. Общий случай периодического случайного блуждания с ветвлением рассмотрен в работе [2]. В этой работе был найден старший член асимптотики при $t \rightarrow \infty$ среднего числа частиц $M(v, u, t)$ в вершине u в момент времени t при условии, что в нулевой момент времени имеется одна частица в вершине v .

В настоящей работе мы используем этот общий результат для вычисления старшего члена асимптотики среднего числа частиц уже для конкретных графов. Рассматриваемые в работе графы соответствуют кристаллическим решеткам графена и станена в модели сильно связанных электронов (tight-binding model). В этой модели кристаллы моделируются периодическими дискретными графами, а электромагнитное взаимодействие – дискретным оператором Шрёдингера. Отметим, что при рассмотрении случайного блуждания на графе матрица интенсивностей переходов случайного блуждания соответствует дискретному оператору Шрёдингера, а потенциал определяет интенсивность ветвления в источниках.

Ключевые слова: ветвящееся случайное блуждание, двумерная периодическая решетка, комбинаторный оператор Лапласа.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 17-11-01136.

Во втором параграфе мы приведем без доказательства результаты работы [2]. Третий параграф посвящен исследованию асимптотического поведения среднего числа частиц для ветвящихся случайных блужданий на графеновой решетке, а последний параграф – на стеновой.

§2. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СРЕДНЕГО ЧИСЛА ЧАСТИЦ

Нам понадобится основной результат (теорема 6) работы [2]. Мы сформулируем его здесь не в полной общности, а только для случая блуждания на решетке \mathbf{Z}^2 и конечного числа возможных переходов из каждой вершины.

Пусть $G = (\mathbf{Z}^2, \mathcal{E})$ – граф с множеством вершин \mathbf{Z}^2 и множеством неориентированных ребер \mathcal{E} . Предположим, что G – связный, не имеет петель и инвариантен относительно сдвигов на неколлинеарные векторы $g_1, g_2 \in \mathbf{Z}^2$ (то есть векторы g_1, g_2 являются периодами графа G). Также предположим, что граф G является локально конечным, то есть в любом круге конечного радиуса может начинаться только конечное число ребер. Через κ_v обозначим число ребер из \mathcal{E} , выходящих из вершины v .

Рассмотрим случайное блуждание с ветвлением на графе G . Это случайное блуждание определяется матрицей переходных интенсивностей $(a(v, u))_{v, u \in \mathbf{Z}^d}$, где

$$a(v, u) = \begin{cases} -\kappa_v & \text{при } v = u; \\ 1 & \text{при } (v, u) \in \mathcal{E}; \\ 0 & \text{при } v \neq u, (v, u) \notin \mathcal{E}. \end{cases} \quad (2.1)$$

Оператор умножения на матрицу $(-a(v, u))_{v, u \in \mathbf{Z}^d}$ обычно называют комбинаторным оператором Лапласа. Переходные интенсивности (2.1) удовлетворяют условиям (i)–(vi) работы [2]. Отметим, что в силу условия локальной конечности графа Γ условие (v) можно заменить на более сильное условие

$$\sum_{u \in \mathbf{Z}^2} \|u\|^n |a(v, u)| < \infty, \quad v \in \mathbf{Z}^2, \quad (2.2)$$

для всех $n \in \mathbf{N}$.

Назовем решеткой Γ множество

$$\Gamma = \{g \in \mathbf{Z}^2 : g = n_1 g_1 + n_2 g_2, \quad n_1, n_2 \in \mathbf{Z}\}. \quad (2.3)$$

Одну и ту же решетку можно задать разными периодами g_1, g_2 . Две вершины $u, v \in \mathbf{Z}^2$ будем называть Γ -эквивалентными, если $v - u \in \Gamma$. Фундаментальной ячейкой будем называть множество

$$\mathcal{C} = \{x \in \mathbf{R}^2 : x = x_1g_1 + x_2g_2, 0 \leq x_j < 1, j = 1, 2\}, \quad (2.4)$$

а фундаментальным множеством вершин – множество

$$\Omega = \mathbf{Z}^2 \cap \mathcal{C}. \quad (2.5)$$

Обозначим число элементов Ω через p , а сами эти элементы через $v_j, j = 1, \dots, p$. Отметим, что при выборе других периодов g_1, g_2 , задающих ту же решетку Γ , множества (2.4) и (2.5) могут измениться. При этом площадь множества (2.4) не меняется, а в множестве (2.5) вершины могут лишь сдвинуться на векторы решетки Γ , но оно все еще будет содержать по одному представителю из каждого класса \mathbf{Z}^2/Γ . Для любой вершины $v \in \mathbf{Z}^2$ существует единственное представление в виде

$$v = v_j + g, \quad v_j \in \Omega, g \in \Gamma.$$

Размножение и гибель частиц в источнике ветвления в вершине $v \in \mathbf{Z}^2$ задается процессом БъенOME–Гальтона–Ватсона (см., например, [6]). Интенсивность деления на k потомков частицы в вершине v обозначается $b_k(v)$. Для коэффициентов $b_k(v)$ выполнено

$$b_1(v) \leq 0, b_k(v) \geq 0 \text{ при } k \neq 1, \quad \sum_{k=0}^{+\infty} b_k(v) = 0.$$

Мы предполагаем, что источники расположены периодически на графе G , то есть

$$b_j(v) = b_j(v + g), \quad g \in \Gamma. \quad (2.6)$$

Из условия периодичности вытекает, что достаточно определить интенсивности деления в источниках на любом наборе из p вершин, не являющихся Γ -эквивалентными. Дополнительно предположим, что следующие величины конечны

$$\beta_j = \sum_{k=1}^{+\infty} kb_k(v_j) < \infty, \quad v_j \in \Omega. \quad (2.7)$$

Это условие означает, что число потомков в каждом источнике на фундаментальном множестве вершин имеет конечный первый момент.

Таким образом, каждая частица, находящаяся в некоторый момент времени в точке $v = v_j + g$, $g \in \Gamma$, независимо от остальных частиц в системе, может за время t перейти с вероятностью $p(t, v, u) = a(v, u)t + o(t)$ в точку $u \neq v$ или произвести $k \neq 1$ потомков, находящихся в точке v , с вероятностью $p_k(v) = b_k(v_j)t + o(t)$, (при $k = 0$ считаем, что число потомков равно 0, то есть частица погибает). Либо частица может просто остаться в вершине v и не разделиться с вероятностью $1 + a(v, v)t + b_1(v_j)t + o(t)$. Отметим, что случайное блуждание, удовлетворяющее вышеперечисленным условиям, является однородным марковским процессом.

Пусть в начальный момент $t = 0$ в системе находится одна частица в точке $v \in \mathbf{Z}^2$. Через $M(v, u, t)$ обозначим среднее число частиц, находящихся в точке $u \in \mathbf{Z}^2$ в момент времени t . В работе [2] показано, что величина $M(v, u, t)$ является единственным решением задачи Коши

$$\begin{cases} \frac{\partial M}{\partial t}(v, u, t) = -(\Delta M(v, u, t)), \\ M(v, u, 0) = \delta_u(v), \end{cases} \quad (2.8)$$

где оператор Δ – это комбинаторный оператор Лапласа на графе G и потенциалом, зависящим только от величин, определенных (2.7). Точнее, для любой $f \in \ell^2(\mathbf{Z}^2)$ выполнено

$$\begin{aligned} \Delta &= \Delta_0 + Q, \quad \text{где} \\ (\Delta_0 f)(v) &= \sum_{u: (v, u) \in \mathcal{E}} (f(v) - f(u)), \\ (Qf)(v_j + g) &= \beta_j f(v_j + g), \quad g \in \Gamma. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Введем в рассмотрение вспомогательную матрицу

$$A(\theta) = \begin{pmatrix} a_{11}(\theta) + \beta_1 & a_{12}(\theta) & \cdots & a_{1p}(\theta) \\ a_{21}(\theta) & a_{22}(\theta) + \beta_2 & \cdots & a_{2p}(\theta) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1}(\theta) & a_{p2}(\theta) & \cdots & a_{pp}(\theta) + \beta_p \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

где коэффициенты матрицы $a_{jk}(\theta)$, $\theta \in \mathbf{R}^2$, выражаются через коэффициенты матрицы переходных интенсивностей как

$$a_{jk}(\theta) = \sum_{g \in \Gamma} a(v_j + g, v_k) e^{-i\langle \theta, g \rangle}.$$

Обозначим через $\lambda_1(\theta)$ старшее собственное значение матрицы $A(\theta)$. Пусть ψ_j – это j -ая координата собственного вектора матрицы $A(0)$,

соответствующего старшему собственному значению $\lambda_1(0)$. В теореме 6 работы [2] показано, что при выполнении некоторых условий, частным случаем которых являются условия (2.1), (2.2) и (2.6), для функции $M(v, u, t)$ справедливо следующее асимптотическое разложение при $t \rightarrow \infty$

$$M(v, u, t) \stackrel{as}{\cong} e^{\lambda_1(0)t} t^{d/2} \sum_{k=0}^{\infty} c_k(v, u) t^{-k}, \quad (2.11)$$

где все коэффициенты $c_k(v, u)$ могут быть вычислены явно, в частности, для любых $g, h \in \Gamma$

$$c_0(v_j + g, v_s + h) = \frac{|\mathcal{C}| \psi_j \psi_s}{(2\pi)^{d/2} |\sqrt{|\det \lambda_1''(0)|}}. \quad (2.12)$$

Замечание. Чтобы привести старший коэффициент асимптотического ряда из теоремы 6 статьи [2] к виду (2.12), достаточно заметить, что произведение объемов элементарных ячеек двух двумерных двойственных решеток равно $4\pi^2$ (см., например, главу 2 в [1]). Мы пишем и используем формулу в таком виде, чтобы не вводить двойственную решетку и связанные с ней объекты.

§3. ГРАФЕНОВАЯ РЕШЕТКА

Графен – двумерная аллотропная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом, соединенных в гексагональную двумерную кристаллическую решетку [7]. Его можно представить как одну плоскость графита, отделенную от объемного кристалла.

Обычно графен изображается как шестиугольная решетка (рис. 1). Соответствующая решетка периодов Γ порождается, например, базисными векторами $g_1 = (1, 0)$ и $g_2 = (0, 2)$. Фундаментальное множество вершин состоит из двух элементов $v_1 = (0, 0)$ и $v_2 = (0, 1)$. Коэффициенты матрицы переходных интенсивностей определяются равенствами

$$\begin{aligned} a(v_1, v_1) &= a(v_2, v_2) = -3, \\ a(v_1, v_2) &= a(v_1, v_2 - g_1) = a(v_1, v_2 - g_2) = 1, \end{aligned}$$

для всех остальных вершин u выполнено $a(v_1, u) = 0$.

Предположим, что в точках $v = v_1 + \Gamma$ находится источник с интенсивностью β_1 , а в точках $v = v_2 + \Gamma$ – источник с интенсивностью β_2 . Соответствующая решетка изображена на рисунке 1.

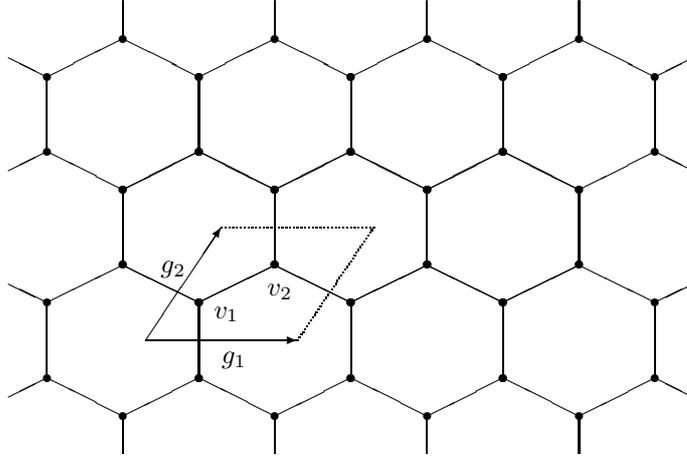


Рис. 1. Графеновая решетка.

Вспомогательная матрица $A(\theta)$ в этом случае имеет следующий вид:

$$A(\theta) = \begin{pmatrix} -3 + \beta_1 & 1 + e^{-i\theta_1} + e^{-2i\theta_2} \\ 1 + e^{i\theta_1} + e^{2i\theta_2} & -3 + \beta_2 \end{pmatrix}.$$

Для старшего собственного значения $\lambda_1(0)$ матрицы $A(0)$ получаем выражение

$$\lambda_1(0) = \frac{1}{2} \left(-6 + \beta_1 + \beta_2 + \sqrt{36 + (\beta_1 - \beta_2)^2} \right).$$

Матрица вторых производных при $\theta = (\theta_1, \theta_2)^T = (0, 0)^T$ имеет вид

$$\lambda_1''(0) = \left\{ \frac{\partial^2 \lambda_1(\theta)}{\partial \theta_j \partial \theta_k} \Big|_{\theta=0} \right\}_{j,k=1}^2 = \frac{4}{\sqrt{(\beta_1 - \beta_2)^2 + 36}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -4 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\sqrt{|\det \lambda_1''(0)|} = \sqrt{\frac{32}{(\beta_1 - \beta_2)^2 + 36}}.$$

Ненормированный собственный вектор ψ при $(\theta_1, \theta_2) = (0, 0)$ может быть выбран следующим образом

$$\psi = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} (\beta_1 - \beta_2 + \sqrt{36 + (\beta_1 - \beta_2)^2}) \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Таким образом, формула (2.11) принимает вид

$$M(v_j + g, v_k + h, t) = \frac{c_0(v_j, v_k)}{t} e^{(-6 + \beta_1 + \beta_2 + \sqrt{36 + (\beta_1 - \beta_2)^2})t/2} (1 + O(t^{-1})),$$

где $j, k = 1, 2, g, h \in \Gamma$. Коэффициент $c_0(v_j, v_k)$ равен

$$c_0(v_j, v_k) = \sqrt{\frac{(\beta_1 - \beta_2)^2 + 36}{32}} \frac{\psi_j \psi_k}{\pi \|\psi\|},$$

где ψ_j – это j -ая координата вектора (3.1).

§4. СТАНЕНОВАЯ РЕШЕТКА

Станен является двумерным материалом и двумерным топологическим изолятором [8]. Он состоит из атомов олова, расположенных в одном гексагональном слое, аналогично графену.

Удобно изображать станеновую решетку в виде шестиугольников с дополнительными вершинами. Решетка с фундаментальным множеством изображены на рисунке 2. Решетка Γ для станена порождается, например, базисными векторами $g_1 = (2, 0)$ и $g_2 = (0, 2)$. Фундаментальное множество вершин состоит из четырех элементов $v_1 = (0, 0)$, $v_2 = (0, 1)$, $v_3 = (1, 0)$ и $v_4 = (1, 1)$. Коэффициенты матрицы переходных интенсивностей определяется равенствами

$$a(v_1, v_1) = a(v_2, v_2) = -4,$$

$$a(v_3, v_3) = a(v_4, v_4) = -1,$$

$$a(v_1, v_2) = a(v_1, v_2 - g_1) = a(v_1, v_2 - g_2) = a(v_1, v_3) = a(v_2, v_4) = 1,$$

для всех остальных вершин u выполнено $a(v_1, u) = 0$.

В случае графеновой решетки мы рассматривали источники общего вида. В данном случае ответы для источников общего вида крайне громоздки, и для простоты мы рассмотрим только случай, когда $\beta_1 = \beta_2 = \alpha$, $\beta_3 = \beta_4 = \beta$. Также мы не приводим значения $\lambda_1''(0)$ в связи с техническими сложностями данного вычисления. Отметим только, что в [2] показано, что $\lambda_1''(0) \neq 0$.

Вспомогательная матрица $A(\theta)$ в этом случае имеет следующий вид

$$A(\theta) = \begin{pmatrix} -4 + \alpha & 1 + e^{-i\theta_1} + e^{-2i\theta_2} & 1 & 0 \\ 1 + e^{i\theta_1} + e^{2i\theta_2} & -4 + \alpha & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 + \beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 + \beta \end{pmatrix}.$$

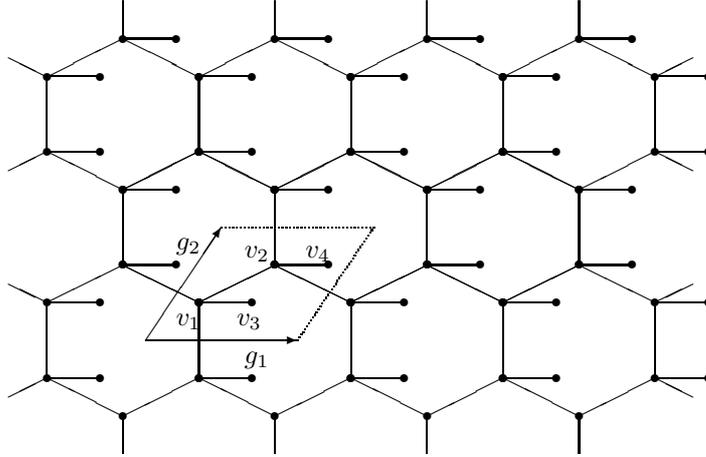


Рис. 2. Станеновая решетка.

Для старшего собственного значения $\lambda_1(0)$ матрицы $A(0)$ получаем выражение

$$\lambda_1(0) = \frac{\alpha + \beta - 2 + \sqrt{4 + (\alpha - \beta)^2}}{2}$$

Ненормированный собственный вектор ψ при $(\theta_1, \theta_2) = (0, 0)$ может быть выбран следующим образом

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha - \beta + \sqrt{4 + (\alpha - \beta)^2} \\ \alpha - \beta + \sqrt{4 + (\alpha - \beta)^2} \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, формула (2.11) принимает вид

$$M(v_j + g, v_k + h, t) = \frac{c_0(v_j, v_k)}{t} e^{(\alpha + \beta - 2 + \sqrt{4 + (\alpha - \beta)^2})t/2} (1 + O(t^{-1})),$$

где $j, k = 1, 2, g, h \in \Gamma$, а коэффициент $c_0(v_j, v_k)$ при конкретных значениях α и β может быть рассчитан численно с помощью (2.12).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. М. Ш. Бирман, Т. А. Суслина, *Периодические дифференциальные операторы второго порядка. Пороговые свойства и усреднения.* — Алгебра и анализ **15**, No. 5 (2003), 1–108.

2. М. В. Платонова, К. С. Рядовкин, *Ветвящиеся случайные блуждания на \mathbf{Z}^d с периодически расположенными источниками ветвления*. — принята в печать в Теория вероятн. и ее примен.
3. Е. Б. Яровая, *Критерии экспоненциального роста числа частиц в моделях ветвящихся случайных блужданий*. — Теория вероятн. и ее примен. **55**, No. 4 (2010), 705–731.
4. Е. Б. Яровая, *Спектральные свойства эволюционных операторов в моделях ветвящихся случайных блужданий*. — Матем. заметки **92**, No. 1 (2012), 123–140.
5. S. Balendhran, S. Walia, H. Nili, S. Sriram, M. Bhaskaran, *Elemental analogues of graphene: silicene, germanene, stanene, and phosphorene. small*, **11**, No. 6 (2015), 640–652.
6. P. Guttorp, V. N. Minin, *Stochastic modeling of scientific data*. CRC Press 2018.
7. A. Neto, F. Guinea, N. Peres, K. Novoselov, A. Geim, *The electronic properties of graphene*, — Rev. Modern. Phys. **81**, No. 1 (2009), 109.
8. S. Saxena, R. P. Chaudhary, S. Shukla, *Stanene: atomically thick free-standing layer of 2D hexagonal tin*. — Sci. Rep. **6** (2016), 31073.

Ryadovkin K. S. Asymptotic behavior of branching random walks on some two-dimensional lattices.

A branching random walk on two dimensional lattices corresponding to graphene and stanene is considered. We assume that sources of branching are located periodically on lattices. An asymptotic of the mean value of particles in each vertex is obtained.

С.-Петербургское отделение
Математического института
им. В. А. Стеклова РАН,
Фонтанка 27, 191023 Санкт-Петербург;
С.-Петербургский
государственный университет,
Университетская наб., д. 7/9,
199034 С.-Петербург, Россия
E-mail: kryadovkin@gmail.com

Поступило 29 октября 2018 г.