4. Itseään välttävä kävely polymeerimallina

Itseään välttävä satunnaiskävely lyhennetään yleensä SAW (engl. “self-avoiding walk”). Se on yksi luonnollisimmista statistisen mekaniikan malleista polymeerin geometrialle. Malli on erittäin helppo määritellä, mutta jo jotkin ensimmäisistä kysymyksistä osoittautuvat hyvin vaikeiksi — malliin liittyy paljon kombinatoriikan ja matemaattisen statistisen fysiikan klassisia avoimia ongelmia. Mallin kvalitatiivinen(kin) käyttäytyminen riippuu jälleen dimensiosta: dimensioissa $d > 4$ nauhakehitelmämenetelmillä [**HS92, BS85**] voidaan osoittaa, että SAW:n termodynamiikka on oleellisesti sama kuin yksinkertaisen satunnaiskävelyn, eikä siten enää tavallaan riipu dimensiosta. Sama käyttäytyminen havaitaan vielä kriittisessä dimensiossa $d = 4$, joskin logaritmisten korjausten kanssa, ja tämän tapauksen käsittely on teknisesti erilainen [**BIS09**]. Nämä korkeat dimensiot eivät kuitenkaan ole kiinnostavimmat, nimenomaan dimensioriippumattomuuden takia (ja toisaalta myös siksi, että polymeerit tyypillisemmin asuvat enintään kolmessa ulottuvuudessa). Fysikaalisesti kiinnostavin dimensio lienee $d = 3$ — valitettavasti matemaatikot eivät osaa sanoa tästä tapauksesta melkeinpä mitään epätriviaalia, ja edes teoreettisilla fyysikoilla ei tunnu olevan kovin hyviä menetelmiä sen käsittelyyn. Toinen kiinnostavista dimensioista on $d = 2$. Myöskään tässä tapauksessa kunnollisia matemaattisia tuloksia ei paljoa ole, mutta konformikenttäteorioilla osataan ennustaa eksakteja vastauksia hämmästyttävän monimutkaisiinkin kysymyksiin. Jopa matemaatikot toivovat lähivuosina läpimurtoa kaksiulotteisen SAW:n ymmärtämisessä, syistä joihin palaamme lyhyesti kurssin loppupuolella.

4.1. Itseään välttävien kävelyjen kombinatoriikkaa

4.1.1. *Äärellisen pituiset yksinkertaiset satunnaiskävelyt*

Ennen tämän luvun varsinaista aihetta, palataan hetkeksi tuttuun yksinkertaiseen satunnaiskävelyyn d-ulotteisella hyperkuutiohilalla $\mathbb{Z}^d$, kts. Luvut I.5-6. Tavallisimmin oletetaan kävely lähteväksi origosta, eli pisteestä $\underline{0} \in \mathbb{Z}^d$. Silloin mahdollisten N askeleen kävelyjen joukko on

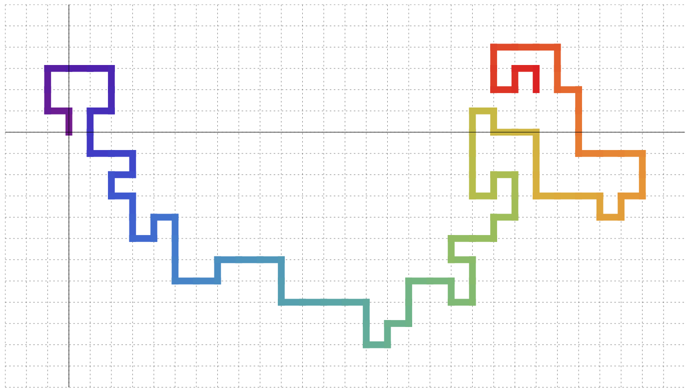
$$\mathcal{W}_N = \Big\{ \mathbf{X} \colon [\![0, N]\!] \to \mathbb{Z}^d \;\Big|\; \mathbf{X}(0) = \underline{0} \text{ ja } \|\mathbf{X}(t) - \mathbf{X}(t-1)\| = 1 \; \forall t \in [\![1, N]\!] \Big\}. \tag{II.21}$$

Joukko $\mathcal{W}_N$ on äärellinen, $\#\mathcal{W}_N = (2d)^N$, ja N askeleen yksinkertainen satunnaiskävely on tasaisesti jakautunut joukolla $\mathcal{W}_N$.

Jos haluamme kävelyjen lähtevän origon sijasta pisteestä $\underline{x} \in \mathbb{Z}^d$, merkitsemme vastaavaa joukkoa $\underline{x} + \mathcal{W}_N$.

Usein on mielekästä liittää kaksi tai useampia kävelyitä yhteen: kävelyjen $\mathbf{X}_1 \in \mathcal{W}_{N_1}$ ja $\mathbf{X}_2 \in \mathcal{W}_{N_2}$ konkatenaatio $\mathbf{X}_1 \boxplus \mathbf{X}_2 \in \mathcal{W}_{N_1+N_2}$ määritellään

$$(\mathbf{X}_1 \boxplus \mathbf{X}_2)(t) = \begin{cases} \mathbf{X}_1(t) & \text{jos } 0 \le t \le N_1 \\ \mathbf{X}_1(N_1) + \mathbf{X}_2(t - N_1) & \text{jos } N_1 < t \le N_1 + N_2 \end{cases}.$$



KUVA II.11. Eräs itseään välttävä 100 askeleen kävely neliöhilalla $\mathbb{Z}^2$. Huomataan, että kaikkia N askeleen pituisia itseään välttäviä kävelyjä ei voi jatkaa äärettömän pitkiksi itseään välttäviksi kävelyiksi. Esimerkiksi tämän kuvan kävely $\mathbf{X}$ on rakentanut itselleen ansan, josta se ei pääse pois: kävelyn pää $\mathbf{X}(N)$ on komplementin $\mathbb{Z}^2 \setminus \mathbf{X}[0, N]$ rajoitetussa komponentissa.

Vastaavasti N_1+N_2 askeleen kävelyn ensimmäiset N_1 ja viimeiset N_2 askelta määrittelevät molemmat kävelyn — tällä tavoin "paloitteleminen" on yllä määritellyn konkatenaation käänteiskuvaus,[5] ja tarvittaessa voimme siten samaistaa seuraavat joukot

$$\mathcal{W}_{N_1+N_2} \cong \mathcal{W}_{N_1} \times \mathcal{W}_{N_2}.$$

4.1.2. *Äärellisen pituiset itseään välttävät satunnaiskävelyt*

Itseään välttäminen on lisäehto kävelyille: sanomme, että kävely $\mathbf{X}$ on itseään välttävä, jos millään eri ajanhetkillä kävelyn paikat eivät voi olla samat, eli

$$\text{kaikilla } t \neq s, \text{ pätee } \mathbf{X}(t) \neq \mathbf{X}(s).$$

Merkitsemme origosta lähtevien itseään välttävien N:n askeleen kävelyjen joukkoa

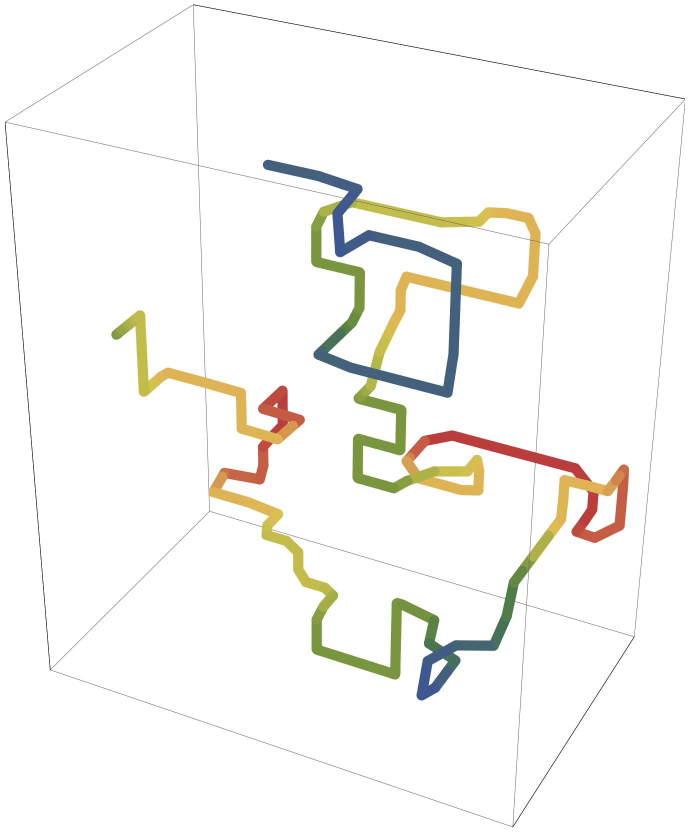
$$\mathcal{C}_N = \left\{ \mathbf{X} \in \mathcal{W}_N \;\middle|\; \forall t, s \in [\![0, N]\!] : t \neq s \Rightarrow \mathbf{X}(t) \neq \mathbf{X}(s) \right\}. \tag{II.22}$$

Kyseessä on varmasti äärellinen joukko, sillä $\mathcal{C}_N \subset \mathcal{W}_N$, ja siis $\#\mathcal{C}_N \leq \#\mathcal{W}_N = (2d)^N$.

Määritelmä II.30. Itseään välttävä N askeleen satunnaiskävely hilalla $\mathbb{Z}^d$ on tasainen jakauma äärellisellä joukolla $\mathcal{C}_N$.

Kuten tavallista statistisen fysiikan malleissa, haluaisimme ottaa termodynaamisen rajan $N \to \infty$: itseään välttävä satunnaiskävely mallintaa N monomeerista koostuvaa polymeeriä, ja ideana on, että monomeerien lukumäärä on suuri, eikä tarkalla lukumäärällä ole olennaista merkitystä esimerkiksi polymeerin geometrisille ominaisuuksille. Itseään välttävän kävelyn tapauksessa tämä osoittautuu hankalaksi. Kuva II.11 sekä seuraava harjoitus selventävät sitä, miksi ääretön yksinkertainen satunnaiskävely on helppo määritellä, kun taas äärettömän itseään välttävän satunnaiskävelyn määritteleminen on vaikeaa.

[5] Varoitamme kuitenkin, että myöhemmin tarkastelemme näitä operaatioita muilla joukoilla, joilla konkatenaatio ja paloitteleminen eivät välttämättä ole bijektiivisiä.



KUVA II.12. Eräs itseään välttävä 150 askeleen kävely kuutiohilalla $\mathbb{Z}^3$.

Tehtävä II.8. Olkoon $\mathfrak{X}$ mitoittuva avaruus, ja ν_N todennäköisyysmitta joukolla $\mathfrak{X}^N$, kaikilla $N \in \mathbb{N}$. Sanomme, että mitat $(\nu_N)_{N\in\mathbb{N}}$ ovat konsistentit, jos kaikilla N, M ja mitallisilla $E_1, \ldots, E_N \subset \mathfrak{X}$ pätee

$$\nu_N\Big[E_1 \times \cdots \times E_N\Big] = \nu_{N+M}\Big[E_1 \times \cdots \times E_N \times \underbrace{\mathfrak{X} \times \cdots \times \mathfrak{X}}_{M \text{ kpl}}\Big].$$

Alla valitsemme $\mathfrak{X} = \mathbb{Z}^d$, ja tulkitsemme $\mathcal{C}_N \subset \mathcal{W}_N \subset \mathfrak{X}^N$ (kävelyn paikat ajanhetkillä $1, 2, \ldots, N$ ovat N alkiota $\mathbb{Z}^d$:ssä).

(a) Kun ν_N on N askeleen yksinkertaisen satunnaiskävelyn jakauma, osoita, että mitat $(\nu_N)_{N\in\mathbb{N}}$ ovat konsistentit.
(b) Kun ν_N on N askeleen itseään välttävän satunnaiskävelyn jakauma, osoita, että mitat $(\nu_N)_{N\in\mathbb{N}}$ eivät ole konsistentit.

Konsistentti jono mittoja määrittelee luontevasti mitan avaruudella $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$, ylläolevassa tapauksessa äärettömien kävelyjen joukolla.[6] Silloin kun mitat eivät ole konsistentit, hyvä lähestymistapa on upottaa kaikki äärellisen mittaiset alkupätkät samaan haluttuun avaruuteen $\mathfrak{X}^{\mathbb{N}}$

$$\mathfrak{X}^1 \hookrightarrow \mathfrak{X}^2 \hookrightarrow \cdots \hookrightarrow \mathfrak{X}^N \hookrightarrow \cdots \hookrightarrow \mathfrak{X}^{\mathbb{N}},$$

määritellä tällä avaruudella hyvin käyttäytyvä topologia, ja tarkastella todennäköisyysmittojen $(\nu_N)_{N\in\mathbb{N}}$ heikkoa suppenemista — jos $\nu_N \xrightarrow{\mathrm{w}} \nu_\infty$, niin ν_∞ on haluttu todennäköisyysmitta termodynaamisella rajalla $N \to \infty$.

[6]Tätä koskeva yleinen tulos on Kolmogorovin laajennuslause.

Polymeerien statistisessa fysiikassa eräs perustavan laatuinen tutkimuskysymys on seuraava.

Avoin ongelma II.31. Dimensioissa $d = 2$ tai $d = 3$, näytä, että N askeleen itseään välttävien kävelyjen jakaumat suppenevat heikosti, kun $N \to \infty$.

4.1.3. *Itseään välttävän polymeerin vapaan energian termodynaaminen raja*

Yllä mainittujen vaikeuksien taustalla on osaltaan itseään välttävien kävelyjen monimutkainen kombinatoriikka. Luonnollisin kombinatorinen kysymys liittyy nimenomaan kävelyjen lukumääriin

$$c_N = \#\mathcal{C}_N. \tag{II.23}$$

Koska $\mathcal{C}_N \subset \mathcal{W}_N$, jono (c_N) kasvaa korkeintaan eksponentiaalisesti. Voimme tietenkin heti hieman parantaa yläraja-arviota, nimittäin muilla kuin ensimmäisellä askeleella ainakin paluu edelliseen pisteeseen voidaan poissulkea ja saadaan $c_N \leq (2d) \times (2d-1)^{N-1}$. Toisaalta kävelyt, jotka ottavat askeleita vain positiivisten koordinaattiakselien suuntiin, eli nk. suunnatut polymeerit, ovat aina itseään välttäviä, joten saamme jonolle myös eksponentiaalisesti kasvavan alarajan

$$d^N \leq c_N \leq (2d) \times (2d-1)^{N-1}.$$

Osoittautuu, että eksponentiaalisella kasvulla on hyvin määritelty tarkka vauhti, eli luku μ siten, että $c_N \sim \mu^N$. Fysikaalisesti tämän väitteen sisältö on, että polymeerien vapaalla energialla on termodynaaminen raja. Nimittäin kaikilla sallituilla polymeereillä $\mathbf{X} \in \mathcal{C}_N$ ajatellaan olevan sama energia, esimerkiksi $H(\mathbf{X}) = 0$, jolloin partitiofunktio

$$Z_N = \sum_{\mathbf{X} \in \mathcal{C}_N} e^{-\beta H(\mathbf{X})} = c_N$$

on täsmälleen mahdollisten polymeerien lukumäärä. Vapaa energia $F_N = \frac{-1}{\beta} \log Z_N$ on puhtaasti entropian (mahdollisten kävelyjen lukumäärän) määräämä, ja yksikköä kohti vapaan energian osuus on

$$\frac{1}{N} F_N = -\frac{\log(c_N)}{\beta N} \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} -\frac{\log(\mu)}{\beta},$$

jos kävelyjen lukumäärän eksponentiaalisen kasvun vauhti on μ.

Sen osoittamiseksi, että eksponentiaalisella kasvulla on hyvin määritelty vauhti tarvitsemme pienen aputuloksen, joka on toistuvasti erittäin hyödyllinen statistisessa fysiikassa.

Lemma II.32 (Subadditiivinen raja-arvolemma)**.** *Jos reaalilukujono* $(a_n)_{n\in\mathbb{N}}$ *on subadditiivinen, eli* $a_{n+m} \leq a_n + a_m$*, niin raja-arvo* $\lim_{n\to\infty}(n^{-1}a_n) = \phi \in [-\infty, +\infty)$ *on olemassa ja kaikilla* n *pätee* $a_n \geq n\phi$*.*

Todistus. Määrittelemme $\phi = \inf_{n\in\mathbb{N}} \frac{a}{n}$, ja osoitamme, että $\liminf \frac{a_n}{n} \geq \phi \geq \liminf \frac{a_n}{n}$, jolloin sekä raja-arvon olemassaoloväite että epäyhtälöväite seuraavat.

Epäyhtälö $\liminf \frac{a_n}{n} \geq \phi$ on ilmeinen suoraan määritelmästä, joten riittää todistaa $\limsup \frac{a_n}{n} \leq \phi$. Kaikilla $\phi' > \phi$ on olemassa jokin n_0 siten, että $\frac{a_{n_0}}{n_0} < \phi'$. Jakoyhtälön avulla kirjoitamme mielivaltaisen n muotoon $n = mn_0 + r$, missä $0 \leq r < n_0$. Subadditiivisuudesta seuraa, että

$a_n = a_{mn_0+r} \leq m a_{n_0} + a_r$ (voimme tässä sopia, että $a_0 = 0$). Silloin saamme

$$\frac{a_n}{n} \leq \frac{m a_{n_0}}{n} + \frac{a_r}{n} = \frac{a_{n_0}}{n_0} \underbrace{\left(\frac{m}{m + r/n_0} \right)}_{\to 1 \text{ kun } n \to \infty} + \underbrace{\frac{a_r}{n}}_{\to 0} .$$

Siksi millä tahansa $\varepsilon > 0$ tarpeeksi suurilla n pätee $\frac{a_n}{n} \leq \phi' + \varepsilon$. Koska $\phi' > \phi$ ja $\varepsilon > 0$ olivat mielivaltaiset, saamme $\limsup \frac{a_n}{n} \leq \phi$. □

Tarkastelemme toisinaan pisteestä $\underline{x} \in \mathbb{Z}^d$ lähteviä N askeleen itseään välttäviä kävelyitä, joiden joukkoa merkitsemme $\underline{x} + \mathcal{C}_N$. Huomautamme, että kahden itseään välttävän kävelyn konkatenaatio ei välttämättä ole itseään välttävä, vaan ainoastaan kävely, $\boxplus \colon \mathcal{C}_N \times \mathcal{C}_M \to \mathcal{W}_{N+M}$. Itseään välttävän kävelyn alkuosa ja loppuosa ovat kuitenkin aina itseään välttäviä, joten saamme injektion $\mathcal{C}_{N+M} \to \mathcal{C}_N \times \mathcal{C}_M$. Erityisesti pätee

$$c_{N+M} \leq c_N \, c_M. \tag{II.24}$$

Tästä seuraa, että jono $a_n = \log(c_n)$ on subadditiivinen, joten edellisestä Lemmasta päättelemme suoraan, että polymeerien vapaalla energialla on termodynaaminen raja, eli että jonon (c_N) eksponentiaalisella kasvulla on hyvin määritelty vauhti.

Propositio II.33. *Raja-arvot*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\log(c_N)}{N} = \phi \qquad \textit{ja} \qquad \lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{c_N} = \mu = e^{\phi}$$

ovat olemassa, ja kaikilla N pätee

$$c_N \geq \mu^N.$$

Tehtävä II.9. Olkoon c_N neliöhilalla $\mathbb{Z}^2$ origosta lähtevien N askeleen itseään välttävien kävelyjen lukumäärä. Laske c_N, kun $N \leq 6$. Käyttäen hyväksi laskemiasi arvoja, päättele, että $c_N \leq 3.035^N$ kaikilla $N \geq 6$, ja että $c_N \leq 2.892^N$ tarpeeksi suurilla N.

4.1.4. *Itseään välttävien kävelyjen lukumäärien asymptotiikasta*

Olemme siis näyttäneet, että

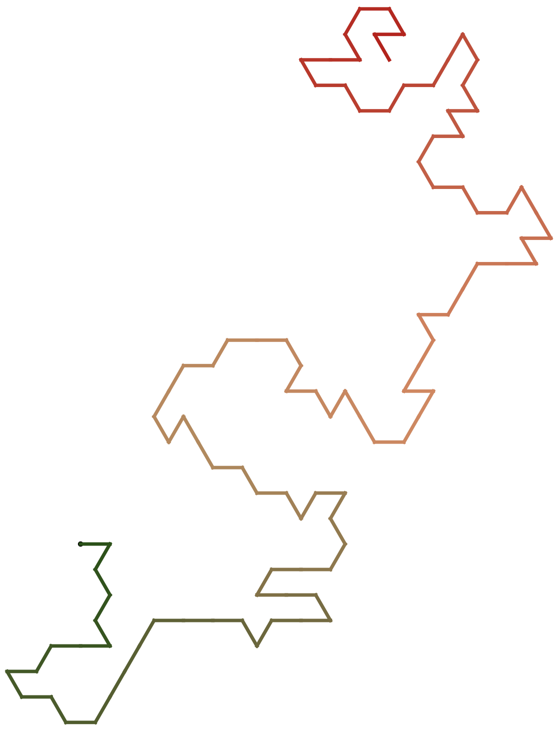
$$c_N = \mu^{N+o(N)} \qquad \text{kun } N \to \infty$$

jollakin $\mu \in [d, 2d-1]$. Oleellisesti paras tunnettu tulos jonon $(c_N)_{N\in\mathbb{N}}$ asymptoottisesta käyttäytymisestä sanoo, että $c_N = \mu^{N+\mathcal{O}(\sqrt{N})}$. Tarkemmin tämä on muotoiltu seuraavassa lauseessa, jonka osoitamme hieman jäljempänä, Luvussa 4.3.

Lause II.34. *Kaikilla $\alpha > \pi\sqrt{2/3}$ on olemassa $A > 0$ siten, että*

$$\mu^N \leq c_N \leq A \mu^N e^{\alpha\sqrt{N}}.$$

Tämä on kuitenkin vielä kaukana siitä, mihin statistisessa mekaniikassa pyritään — dimensioissa $d = 2$ ja $d = 3$ seuraava konjektuuri on yksi tärkeimmistä itseään välttävään kävelyn liittyvistä avoimista tutkimuskysymyksistä.



Kuva II.13. Fysiikan kannalta ei pitäisi olla olennaista, millä d-ulotteisella hilalla itseään välttäviä kävelyitä tarkastellaan. Tämän kuvan itseään välttävä kävely kolmiohilalla mallintaa kahdessa ulottuvuudessa asuvaa polymeeriä siinä missä Kuvan II.11 neliöhilaversiokin.

Konjektuuri II.35. Yleisesti uskotaan, että on olemassa vakiot[7] γ ja A siten, että

$$c_N = N^{\gamma-1}\mu^N(A + o(1)).$$

Vakio A, kuten myös vakio μ, ovat ei-universaaleja renormalisaatioryhmän mielessä: niiden numeeriset arvot riippuvat kysymyksen asettelun yksityiskohdista, esimerkiksi niin, että neliöhilalla, kolmiohilalla (katso Kuva II.13), tai vaikkapa hunajakennohilalla μ:n ja A:n arvot ovat epäilemättä eri. Fysikaalisesti tärkein vakio γ sen sijaan on eräs kriittinen eksponentti, ja sen uskotaan olevan universaali niin, että esimerkiksi kaikille d-ulotteisille hiloille sen arvo on sama, ja jopa niin, että kaikille erilaisille polymeerimalleille, jotka kuvaavat samaa fysikaalista tilannetta, γ on edelleen sama. Konjekturaaliset arvot ovat $\gamma = \frac{43}{32}$ kun $d = 2$ (tämä eksakti konjektuuri on saatu konformikenttäteoriasta ja Coulombin kaasuargumentistä), $\gamma \approx 1.162$ kun $d = 3$ (tämä on numeerisista simulaatioista estimoitu likiarvo), ja lopulta ylemmän kriittisen dimension yläpuolella, kun $d \geq 4$, kriittinen eksponentti ei enää riipu dimensiosta vaan $\gamma = 1$ (Gordon Slade on itseasiassa osoittanut nauhakehitelmämenetelmillä, että tarpeeksi korkeissa dimensioissa tämä pätee [**Sla87, Sla89**]). Dimensiossa $d = 4$ korjaukset ovat logaritmisia, joten kriittisen eksponentin määrittelee asymptotiikka $c_N = N^{\gamma-1+o(1)}\mu^N$.

Kuitenkin jopa seuraava vaatimattomalta tuntuva parannus äskeiseen alkeelliseen tulokseemme on vielä avoin matemaattinen ongelma (dimensiossa $d = 2, 3, 4$).

[7]Näyttäisi ehkä luonnollisemmalta seuraavissa kaavoissa käyttää vakion γ sijasta vakiota $\gamma - 1$, mutta seuraamme tavallisia konventioita kriittisten eksponenttien nimeämiseksi. Subadditiivisuusargumenttimme muuten kertoo, että sikäli kun kriittinen eksponentti γ ylipäänsä on olemassa, se toteuttaa $\gamma \geq 1$.

Avoin ongelma II.36. Näytä, että $\lim_{N\to\infty} \frac{c_{N+1}}{c_N} = \mu$.

Mainitaan vielä, että Harry Kesten on onnistunut osoittamaan, että $\lim_{N\to\infty} \frac{c_{N+2}}{c_N} = \mu^2$ [**Kes63**].

Tehtävä II.10. Oletamme alla eri muodoissa konjekturaalisen asymptotiikan itseään välttävien kävelyjen lukumäärälle c_N, ja tarkastelemme implikaatioita todennäköisyydelle, jolla kaksi riippumatonta pitkää polymeeriä vältteleväť toisiaan.

(1) Olkoot $\mathbf{X}_1$ ja $\mathbf{X}_2$ riippumattomia origosta lähteviä N askeleen itseään välttäviä kävelyitä $\mathbb{Z}^d$:lla. Olettaen, että $c_N = \mu^N N^{\gamma-1+o(1)}$, osoita seuraava välttelytodennäköisyyksien asymptotiikka
$$\mathsf{P}\left[\text{kaikilla } t_1, t_2 > 0 \text{ pätee } \mathbf{X}_1(t_1) \neq \mathbf{X}_2(t_2)\right] = N^{1-\gamma+o(1)}.$$

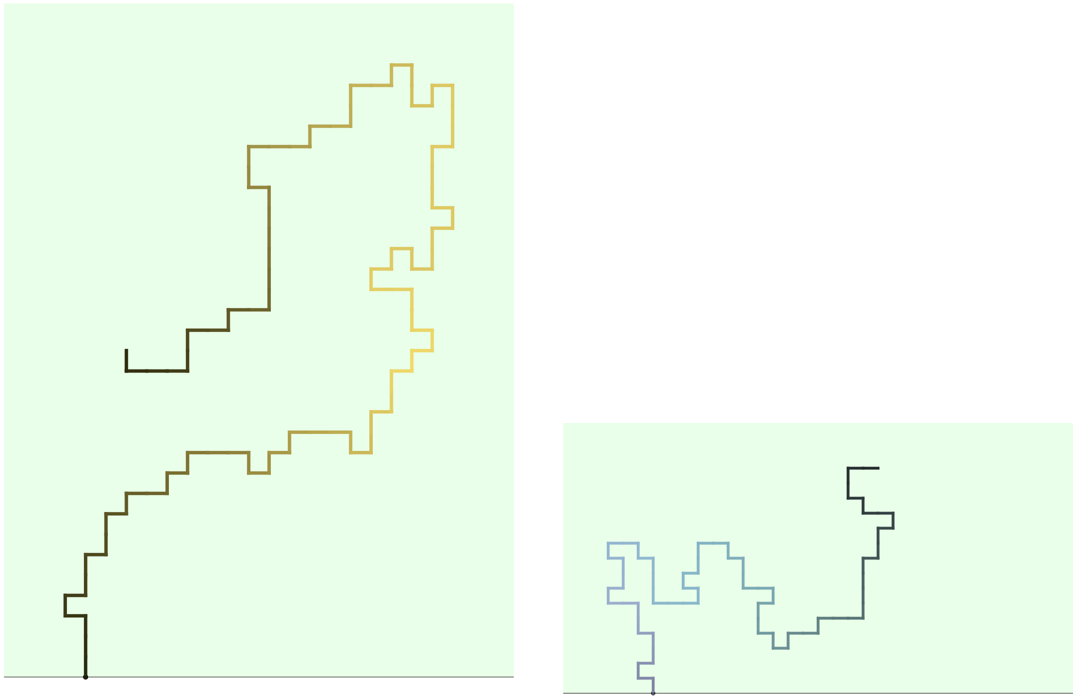
(2) Olkoot $\mathbf{X}_1$ ja $\mathbf{X}_2$ riippumattomia N askeleen itseään välttäviä kävelyitä $\mathbb{Z}^d$:lla, joiden alkupisteet ovat kaksi $\mathbb{Z}^d$:n vierekkäistä pistettä. Oletetaan asymptotiikka $c_N = \mu^N N^{\gamma-1}(A + o(1))$. Osoita, että silloin seuraava raja-arvo on olemassa, ja laske se
$$\lim_{N\to\infty} \left(\frac{\mathsf{P}\left[\text{kaikilla } t_1, t_2 \geq 0 \text{ pätee } \mathbf{X}_1(t_1) \neq \mathbf{X}_2(t_2)\right]}{N^{1-\gamma}} \right)$$

Tämä tehtävä näyttää, että myös probabilistisesti vakio γ (jonka olemassaolo siis on vielä konjektuuri) on relevantimpi kuin ei-universaalit vakiot μ ja A.

4.2. Itseään välttävät sillat ja kävelyt puoliavaruudessa

Tarkastelemaan seuraavaksi itseään välttäviä kävelyitä puoliavaruudessa
$$\mathbb{H}_d = \mathbb{N} \times \mathbb{Z}^{d-1} \subset \mathbb{Z}^d,$$
jossa ensimmäinen koordinaatti on rajoitettu positiiviseksi (lähtöpistettä $\underline{0}$ lukuunottamatta). Kutsumme alempana ensimmäistä koordinaattia korkeudeksi, ja
$$\text{kun } \underline{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d) \in \mathbb{Z}^d, \quad \text{merkitsemme} \quad \pi_1 \underline{x} = x_1.$$
Itseään välttävien puoliavaruuskävelyjen joukko on
$$\mathcal{H}_N = \left\{ \mathbf{X} \in \mathcal{C}_N \;\middle|\; \forall t > 0 : \pi_1 \mathbf{X}(t) > 0 \right\}.$$
Myös näin saatu malli on fysikaalisesti relevantti polymeerimalli, joka kuvaa tapausta, jossa polymeerin yksi pää on kiinnitetty jonkinlaiseen kalvoon. Kuva II.14(a) esittää puoliavaruuskävelyä tapauksessa $d = 2$. Jälleen mahdollisia kävelyjä on varmasti vain äärellisen monta, sillä $\mathcal{H}_N \subset \mathcal{C}_N \subset \mathcal{W}_N$.

Mielivaltaisten itseään välttävien puolitasokävelyjen sijasta osoittautuu nokkelaksi ensin tarkastella vain osajoukkoa, nimittäin itseään välttäviä siltoja. Sanomme, että $\mathbf{X} \in \mathcal{H}_N$ on N:n askeleen itseään välttävä silta, jos sen korkeus (ensimmäinen koordinaatti) on suurimillaan päätepisteessä. Kuva II.14(b) esittää itseään välttävää siltaa dimensiossa $d = 2$. Merkitsemme N askeleen itseään välttävien siltojen joukkoa
$$\mathcal{B}_N = \left\{ \mathbf{X} \in \mathcal{C}_N \;\middle|\; \forall t > 0 : 0 < \pi_1 \mathbf{X}(t) \leq \pi_1 \mathbf{X}(N) \right\}.$$
Kyseessä on jälleen kerran epäilemättä äärellinen joukko, sillä
$$\mathcal{B}_N \subset \mathcal{H}_N \subset \mathcal{C}_N \subset \mathcal{W}_N.$$
Erityisesti lukumäärä $b_N = \#\mathcal{B}_N$ on rajoitettu ylhäältä itseään välttävien puoliavaruuskävelyjen lukumäärällä, ja alhaalta vain positiivisten koordinaattiakselien



(a) Itseään välttävä puoliavaruuskävely (b) Itseään välttävä silta

Kuva II.14. Itseään välttävät puoliavaruuskävelyt ja sillat ovat myös kiinnostavia statistisen fysiikan malleja, ja useat kombinatoriset argumentit perustuvat niihin.

suuntiin etenevien kävelyjen lukumäärällä (nyt kuitenkin ensimmäinen askel on välttämättä $+\underline{e}_1$). Yhteenvetona, lukumäärille on voimassa arviot

$$d^{N-1} \leq b_N \leq h_N \leq c_N \leq 2d(2d-1)^{N-1}. \tag{II.25}$$

Etu, joka saavutetaan siltoja tarkastelemalla, on kävelyn paloitteluargumentin toimiminen päinvastaiseen suuntaan kuin yleisille kävelyille. Muistutetaan vielä, että mikä tahansa $N+M$ askeleen itseään välttävä kävely voitiin paloitella kahdeksi palaksi, N ja M askeleen itseään välttäviksi kävelyiksi, ja tästä seurasi submultiplikatiivisuus $c_{N+M} \leq c_N c_M$. Käänteinen ei toimi itseään välttäville kävelyille, mutta toimii itseään välttäville silloille: jos on annettu N:n ja M:n askeleen itseään välttävät sillat $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_N$ ja $\mathbf{X}' \in \mathcal{B}_M$, niin konkatenaatio $\mathbf{X} \boxplus \mathbf{X}'$ on $N+M$ askeleen itseään välttävä silta, sillä ensimmäistä koordinaattia koskevat ehdot takaavat, että liimaten rakennettu uusi kävely pysyy itseään välttävänä. Konkatenaation $\mathcal{B}_N \times \mathcal{B}_M \to \mathcal{B}_{N+M}$ injektiivisyydestä seuraa supermultiplikatiivisuus siltojen lukumäärille,

$$b_{N+M} \geq b_N b_M.$$

Tätä voidaan käyttää täsmälleen samoin kuin submultiplikatiivisuutta itseään välttäville kävelyille.

Propositio II.37. *Raja-arvot*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\log(b_N)}{N} = \tilde{\phi} \qquad \textit{ja} \qquad \lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{b_N} = \tilde{\mu} = e^{\tilde{\phi}}$$

ovat olemassa, ja kaikilla N pätee

$$b_N \leq \tilde{\mu}^N.$$

Todistus. Määrittelemällä $a_n = -\log(b_n)$ saadaan subadditiivinen jono, ja väitteet seuraavat Lemmasta II.32. □

Tehtävä II.11. Tarkastellaan dimensiota $d = 2$. Osoita, että tarpeeksi suurilla N pätee

$$b_N \geq 2.101^N.$$

Kuinka suuri on tarpeeksi suuri? Toisin sanoen, etsittävä myös N_0 siten, että y.o. epäyhtälö pätee kaikilla $N \geq N_0$.

Tehtävä II.12. Tarkastellaan edelleen dimensiota $d = 2$. Osoita, että

$$\mu \geq 2.339.$$

4.3. Siltojen, puoliavaruuskävelyjen ja kävelyjen lukumäärien vertailuja

Tähän mennessä olemme nähneet, että

$$\tilde{\mu}^N \sim b_N \leq h_N \leq c_N \sim \mu^N,$$

ja siten välttämättä $\tilde{\mu} \leq \mu$. Tulemme osoittamaan, että $\tilde{\mu} = \mu$, eli että termodynaamisella rajalla vapaa energia yksikköä kohti on sama itseään välttäville polymeereille koko avaruudessa ja puoliavaruudessa.[8]

Näyttääksemme, että eksponentiaalisen kasvun nopeus kaikille yllä määrittelemillemme itseään välttäville otuksille on sama, tarvitsemme epäyhtälöitä päinvastaiseen suuntaan: haluamme lopulta rajoittaa itseään välttävien kävelyjen lukumäärän ylhäältä oleellisesti itseään välttävien siltojen lukumäärällä.

4.3.1. *Aputulos partitioiden lukumäärästä*

Aloitamme partitioiden lukumäärien asymptotiikkaa koskevasta aputuloksesta, jonka alun perin todistivat Hardy ja Ramanujan vuonna 1917 [**HR18**]. Merkitsemme luvun N erillisten partitioiden lukumäärää

$$p'_N = \# \left\{ (a_1, \ldots, a_k) \;\middle|\; k \in \mathbb{N},\ \forall j : a_j \in \mathbb{N},\ a_1 > a_2 > \cdots > a_k > 0,\ \sum_{j=1}^{k} a_j = N \right\}. \tag{II.26}$$

Haluamme oikeastaan vain muotoa $p'_N \leq e^{\mathcal{O}(\sqrt{N})}$ olevan ylärajan, jolle lukija halutessaan löytää lyhyemmän täysin alkeellisen todistuksen myös Erdösin vuonna 1942 julkaisemasta artikkelista [**Erd42**] (Erdösin todistus perustuu nokkelaan havaintoon, kun taas alla esittämämme todistuksen strategia on hyvin geneerinen eikä vaadi erityistä kekseliäisyyttä).

[8]Tämä on fysikaalisesti odotettu tulos. Huomautetaan samalla, että konjekturaaliset polynomiset korjaukset ovat eri.

Lemma II.38. *Kaikilla $\tilde{\alpha} > \frac{\pi}{\sqrt{3}}$ on olemassa $C > 0$ siten, että erillisten partitioiden lukumäärät p'_N toteuttavat kaikilla N*

$$p'_N \leq C e^{\tilde{\alpha}\sqrt{N}}.$$

Todistus. Määritellään erillisten partitioiden lukumäärän generoiva funktio, potenssisarja

$$Q(q) = \sum_{N=0}^{\infty} p'_N q^N .$$

Tarkastelemme alempana tämän generoivan funktion singulariteettia pisteessä $q = 1$: tulemme osoittamaan, että kaikilla $\varepsilon > 0$, on olemassa $q_0 < 1$ siten, että kun $q_0 < q < 1$, pätee

$$Q(q) \leq \exp\Big(\big(\frac{\pi^2}{12} + \varepsilon\big)(1-q)^{-1} \Big). \tag{II.27}$$

Kun olemme tämän osoittaneet, voimme arvioida erillisten partitioiden lukumäärää p'_N seuraavasti: millä tahansa $q \in (q_0, 1)$ pätee

$$\begin{aligned} p'_N &\leq \sum_{n=0}^{N} p'_n \leq \sum_{n=0}^{N} p'_n q^{n-N} \leq q^{-N} \sum_{n=0}^{\infty} p'_n q^n = q^{-N}\, Q(q) \\ &\leq \exp\Big(-N\log(q) + \big(\frac{\pi^2}{12} + \varepsilon\big)(1-q)^{-1} \Big). \end{aligned}$$

Paras arvio saadaan optimoimalla parametria q. Valinta $q = 1 - \frac{\pi}{\sqrt{12N}}$ on riittävän hyvä, ja sitä voidaan käyttää tarpeeksi suurilla N. Tällä valinnalla saamme

$$p'_N \leq \exp\Big(\big(\frac{\pi}{\sqrt{3}} + o(\varepsilon)\big)\sqrt{N} \Big).$$

Siis millä tahansa $\varepsilon' > 0$ tarpeeksi suurilla N pätee $p'_N \leq \exp\big((\pi/\sqrt{3} + \varepsilon')\sqrt{N}\big)$. Äärellisen monta pientä N voidaan taas hoitaa vaikkapa vakion C kustannuksella.

Todistuksen loppuun saattamiseksi osoitamme arvion (II.27) generoivalle funktiolle. Ensinnäkin, generoivalle funktiolle lauseke

$$Q(q) = \sum_{N=0}^{\infty} p'_N q^N = \prod_{j=1}^{\infty} (1 + q^j)$$

(oikean puolen lauseke on yksikkökiekossa analyyttinen funktio, ja sillä on haluttu potenssisarja origossa). Ottamalla tästä puolittain logaritmit, ja käyttämällä sarjakehitelmää $\log(1+\delta) = -\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \delta^m$ saamme

$$\log(Q(q)) = \sum_{j=1}^{\infty} \log(1 + q^j) = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m} q^{mj}.$$

Fubinin lauseella vaihdamme summausten järjestyksen (summa muuttujien j ja m yli suppenee absoluuttisesti kun $|q| < 1$) ja laskemme edelleen

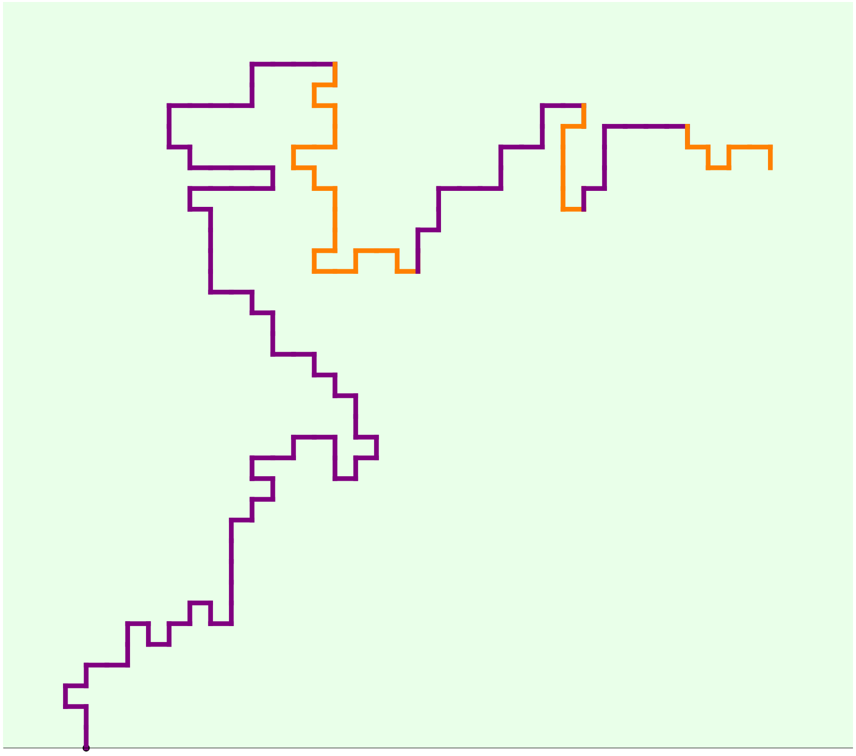
$$\log(Q(q)) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m} q^{mj} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m} \frac{q^m}{1-q^m}.$$

Sitten huomaamme, että

$$(1-q)\frac{q^m}{1-q^m} = \frac{1}{q^{-1} + q^{-2} + \cdots + q^{1-m}} \longrightarrow \frac{1}{m} \qquad \text{kun } q \nearrow 1,$$

ja tämä raja on monotonisesti kasvava. Nähdään, että termit $(1-q)\frac{(-1)^{m-1}}{m}\frac{q^m}{1-q^m}$ ovat itseisarvoltaan aina pienempiä kuin $\frac{1}{m^2}$, joka on summautuva, joten dominoidun konvergenssin lauseesta saadaan

$$(1-q)\log(Q(q)) \longrightarrow \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m^2} = \frac{\pi^2}{12} \qquad \text{kun } q \nearrow 1.$$



Kuva II.15. Itseään välttävä puoliavaruuskävely voidaan paloitella siltoihin, ja näin saadaan siltojen lukumäärän b_N avulla lausuttu yläraja puoliavaruuskävelyjen lukumäärälle h_N.

Erityisesti kaikilla $\varepsilon > 0$ on olemassa $q_0 < 1$ siten, että kun $q \in (q_0, 1)$ pätee arvio $\log(Q(q)) \le \left(\frac{\pi^2}{12} + \varepsilon\right)(1-q)^{-1}$, ja yläraja (II.27) seuraa. □

Tehtävä II.13. Luvun N partitioiden lukumäärä (ei välttämättä erillisten partitioiden) on

$$p_N = \# \left\{ (a_1, \ldots, a_k) \;\middle|\; k \in \mathbb{N},\ \forall j : a_j \in \mathbb{N},\ a_1 \ge a_2 \ge \cdots \ge a_k \ge 1,\ \sum_{j=1}^{k} a_j = N \right\}. \qquad \text{(II.28)}$$

Osoita ylläolevaa todistusta mukaellen, että kaikilla $\alpha > \pi\sqrt{2/3}$ on olemassa $C > 0$ siten, että partitioiden lukumäärät p_N toteuttavat kaikilla N

$$p_N \le C e^{\alpha\sqrt{N}}.$$

4.3.2. *Puoliavaruuskävelyjen lukumäärän yläraja siltojen avulla*

Tarkastellaan sitten siltojen ja puoliavaruuskävelyjen lukumäärien vertailua ilmeistä arviota $b_N \le h_N$ vastakkaiseen suuntaan.

Lemma II.39. *Kaikilla N pätee*

$$h_N \le p'_N b_N.$$

Todistus. Ideana on katkoa puoliavaruuskävely osiin, "ylös" ja "alas" meneviin siltoihin, kuten Kuvassa II.15. Olkoon $\mathbf{X} \in \mathcal{H}_N$, $N > 0$. Tulemme valitsemaan ajanhetken t_1 niin, että kävely on korkeimmillaan, sitten ajanhetken $t_2 > t_1$ niin, että kävely on matalimmillaan ajan t_1 jälkeen, sitten ajanhetken $t_3 > t_2$ niin, että kävely on korkeimmillaan ajan t_2 jälkeen, ja niin edelleen, kunnes tulemme kävelyn loppuun $t_k = N$ jollakin $k \geq 1$. Edellinen ei vielä tarkkaan ottaen määrittele ajanhetkiä yksikäsitteisesti, koska kävely saattaa viettää samalla korkeudella enemmänkin aikaa. Tarkemmin ottaen valitsemme aina viimeiset mahdolliset ajanhetket, ja määrittelemme siis

$$\begin{aligned} t_1 &= \max\left\{ t > 0 \;\Big|\; \mathbf{X}_1(t) = \max_{0 \leq t' \leq N} (\mathbf{X}_1(t')) \right\} \\ t_2 &= \max\left\{ t > t_1 \;\Big|\; \mathbf{X}_1(t) = \min_{t_1 < t' \leq N} (\mathbf{X}_1(t')) \right\} \\ &\;\;\vdots \end{aligned}$$

ja tulkitsemme tarvittaessa $t_0 = 0$. Ajanhetkien t_{j-1} ja t_j välillä kävelyn korkeudessa tapahtuu muutos $a_j = |\mathbf{X}_1(t_j) - \mathbf{X}_1(t_{j-1})| > 0$ ja korkeuden muutokset ovat konstruktion perusteella väheneviä

$$a_1 > a_2 > \cdots > a_k \geq 1.$$

Olkoon $\mathcal{H}_N[a_1, a_2, \ldots, a_k]$ niiden N askeleen puoliavaruuskävelyjen joukko, joille yllä määritellyt korkeuden muutokset ovat $a_1, \ldots, a_k$. Merkitään tämän joukon alkioiden lukumäärää $h_N[a_1, a_2, \ldots, a_k]$. Ensinnäkin toteamme, että tapaus $k = 1$ vastaa täsmälleen siltoja, $\mathcal{B}_N = \bigsqcup_{a \geq 1} \mathcal{H}_N[a]$ kun $N \geq 1$. Erityisesti N askeleen siltojen lukumäärä on $b_N = \sum_{a=1}^{N} h_N[a]$.

Jos $k > 1$, saamme yläraja-arvioita lukumäärälle $h_N[a_1, a_2, \ldots, a_k]$ seuraavasti. Huomaamme, että jos ajanhetken t_1 jälkeen peilaamme kävelyn $\mathbf{X} \in \mathcal{H}_N[a_1, a_2, \ldots, a_k]$ ensimmäisen koordinaatin tason $\mathbf{X}_1(t_1)$ suhteen, saamme kävelyn $\mathbf{X}' \in \mathcal{H}_N[a_1 + a_2, a_3, \ldots, a_k]$. Tämä peilaus on injektiivinen operaatio joukolla $\mathcal{H}_N[a_1, a_2, \ldots, a_k]$, joten voimme arvioida

$$h_N[a_1, a_2, a_3, \ldots, a_k] \leq h_N[a_1 + a_2, a_3, \ldots, a_k]$$

ja edelleen rekursiivisesti samalla peilausargumentilla saamme

$$h_N[a_1, a_2, a_3, \ldots, a_k] \leq h_N[a_1 + a_2 + a_3 + \cdots + a_k] = b_N[\sum_{i=1}^{k} a_i].$$

Arvioidaksemme puoliavaruuskävelyjen lukumäärää h_N ylhäältä siltojen lukumäärällä b_N, summaamme kaikkien mahdollisten katkaisuhetkien välisten korkeuserojen yli. Ensinnäkin, annetuilla korkeuseroilla $a_1 > a_2 > \cdots > a_k > 1$ pätee ylläolevan perusteella ainakin $h_N[a_1, a_2, a_3, \ldots, a_k] \leq b_N[A]$, missä $A = \sum_{i=1}^{k} a_i$. Kaikkien puoliavaruuskävelyjen lukumäärälle saadaan siis

$$\begin{aligned} h_N &= \sum_{k=1}^{N} \sum_{a_1 > a_2 > \cdots > a_k > 0} h_N[a_1, a_2, \ldots, a_k] \leq \sum_{k=1}^{N} \sum_{a_1 > a_2 > \cdots > a_k > 0} b_N[\sum_{i=1}^{k} a_i] \\ &\leq \sum_{A=0}^{N} p'_A b_N[A] \leq p'_N \sum_{A=0}^{N} b_N[A] = p'_N b_N. \end{aligned}$$

□

Kirjallisuutta

[AD99] David Aldous and Persi Diaconis. Longest increasing subsequences: from patience sorting to the Baik-Deift-Johansson theorem. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 36(4):413–432, 1999.

[BIS09] David C. Brydges, John Z. Imbrie, and Gordon Slade. Functional integral representations for self-avoiding walk. *Probability Surveys*, 6:34–61, 2009.

[BS85] David Brydges and Thomas Spencer. Self-avoiding walk in 5 or more dimensions. *Comm. Math. Phys.*, 97(1-2):125–148, 1985.

[Dur96] Richard Durrett. *Probability: Theory and Examples.* Duxbury Press, 2nd edition, 1996.

[Erd42] P. Erdös. On an elementary proof of some asymptotic formulas in the theory of partitions. *Ann. Math.*, 43:437–450, 1942.

[ET85] G. Elfving and P. Tuominen. *Todennäköisyyslaskenta II.* Limes ry, Helsinki, 1985.

[FS10] Patrik L. Ferrari and Herbert Spohn. Random growth models. Review article, [arXiv:1003.0881]., 2010.

[Gri10] Geoffrey Grimmett. *Probability on graphs*, volume 1 of *IMS Textbooks Series.* Cambridge University Press, 2010.

[Hol02] Ilkka Holopainen. Mitta ja integraali, 2002. Luentomuistiinpanot, Helsingin yliopisto.

[HR18] G. H. Hardy and S. Ramanujan. Asymptotic formulae in combinatory analysis. *Proc. London Math. Soc.*, 17:75–115, 1918.

[HS92] Takashi Hara and Gordon Slade. Self-avoiding walk in five or more dimensions I. The critical behaviour. *Commun. Math. Phys.*, 147:101–136, 1992.

[Kes63] Harry Kesten. On the number of self-avoiding walks. *J. Math. Phys*, 4:960–.969, 1963.

[Kup12] Antti Kupiainen. Introduction to statistical mechanics, 2012. Luentomuistiinpanot, Helsingin yliopisto.

[Rei98] Linda E. Reichl. *A modern course in statistical physics.* John Wiley & Sons, Inc, 2nd edition, 1998.

[Sla87] Gordon Slade. The diffusion of self-avoiding random walk in high dimensions. *Commun. Math. Phys.*, 110:661–683, 1987.

[Sla89] Gordon Slade. The scaling limit of self-avoiding random walk in high dimensions. *Ann. Probab.*, 17:91–107, 1989.

[Sot06] Tommi Sottinen. Todennäköisyysteoria, 2006. Luentomuistiinpanot, Helsingin yliopisto.

[Tuo07] Pekka Tuominen. *Todennäköisyyslaskenta I.* Limes ry., 8. painos edition, 2007.

[Väi07] Jussi Väisälä. *Topologia I.* Limes ry., 4. painos edition, 2007.

[Wil91] David Williams. *Probability with Martingales.* Cambridge Univ. Press, 1991.