Selbstvermeidende Irrfahrten

Andre Fischer

15. April 2024

In dieser Arbeit werden selbstvermeidende Irrfahrten betrachtet und grundlegende Definitionen und Erkenntnisse dargestellt. Hierzu wird zunächst definiert was eine Irrfahrt im d-dimensionalen Raum ist und was die Eigenschaft der Selbstvermeidung bedeutet und wie dies mathematisch beschrieben werden kann. Weiter wird die Bindungskonstante eingeführt und es wird eine Abschätzungen der Konstante gezeigt. Anschließend folgt ein Ausblick, der aktuelle Erkenntnisse und offene Fragen zeigt.

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen

1.1 Grundlagen aus der Graphentheorie

Definition 1. *Ein Graph $G = (V, E)$ ist ein Paar mit*

(i) einer endlichen Menge $V = V(G)$, den Knoten/Ecken von G

(ii) einer Menge $E = E(G) \subseteq \binom{V}{2}$, den Kanten von G.

Definition 2. *Das d-dimensionale (hyperdimensionale) ganzzahlige Gitter ist für natürliche Zahlen $d \in \mathbb{N}$ definiert als*

$$\mathbb{Z}^d = \{(x_1, \ldots, x_d) : x_i \in \mathbb{Z}, i = 1, \ldots, d\} \subset \mathbb{R}^d$$

Das hyperdimensionale Gitter kann als Graph im d-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^d$ aufgefasst werden, dessen Knoten die ganzzahligen Punkte $V = \{(x_1, \ldots, x_d) | x_1, \ldots, x_d \in \mathbb{Z}\} \subset \mathbb{R}^d$ sind. Weiter sind jeweils zwei benachbarte Knoten durch eine Kante der Länge eins verbunden.

Definition 3. *Sei $G = (V, E)$ ein Graph, $u, v \in V$ und $e, f \in E$. Dann definieren wir*

(i) u ist inzident zu $e :\Leftrightarrow u \in e$

(ii) u ist adjazent (benachbart) zu $v :\Leftrightarrow \{u, v\} \in e$

(iii) e ist inzident zu $f :\Leftrightarrow e \cap f \neq \emptyset$

(iv) Nachbarschaft von $u : N(u) := \{v | \{u, v\} \in E\}$

(v) (offene) Nachbarschaft von $S \subseteq V : N(S) := \bigcup_{u \in S} N(u) \setminus S$

(vi) Grad eines Knoten $u : deg(u) := |N(u)|$

Definition 4. *Sei $G = (V, E)$ ein Graph. Ein Weg W in G ist eine Sequenz*

$$v_0 e_1 v_1 e_2 \ldots v_{k-1} e_k v_k$$

von Knoten $v_i \in V$ und Ecken $e_j \in E$ sodass $e_j = \{v_{j-1}, v_j\}$ für alle $i, j = 1 \ldots k$. Die Knoten v_0 und v_k sind die Endknoten von W. Die Länge des Wegs ist die Anzahl der Ecken. Weiter gibt es einige wichtige spezielle Wege:

(i) Ein geschlossener Weg ist ein Weg mit $v_o = v_k$.

(ii) Ein Pfad in G ist ein Weg sodass alle v_i paarweise verschieden sind.

(iii) Ein kantendisjunkter Weg in G ist ein Weg sodass alle e_j paarweise verschieden sind.

(iv) *Ein Kreis ist ein geschlossener Weg mit $k \geq 3$ und $v_i \neq v_j$ für alle $i \neq j$ mit $\{i, j\} \neq \{0, k\}$. Ein Kreis ist ungerade bzw. gerade, wenn seine Länge eine ungerade bzw. gerade Zahl ist.*

Definition 5. *Das Standardskalarprodukt*
Sei $V = \mathbb{R}^n$ ein Vektorraum und $x, y \in V$ mit $x = (x_1, \ldots, x_d)$ und $y = (y_1, \ldots, y_d)$. Dann heißt die Abbildung

$$\langle ., . \rangle : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \langle x, y \rangle \mapsto x_1 y_1 + \ldots x_n y_n$$

das Standardskalarprodukt auf $\mathbb{R}^n$. Weiter heißt $(\mathbb{R}^n, \langle ., . \rangle)$ euklidischer Vektorraum. Eigenschaften

1. *Symmetrie: $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$*

2. *Linearität: $\langle ax + y, z \rangle = a\langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$*

3. *Positive Definitheit: $\langle x, x \rangle > 0$ für alle $x \neq 0$*

Die euklidische Norm ist definiert als

$$\|.\| : \mathbb{R}^n \to [0, \infty), x \mapsto \sqrt{< x, x >} = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_d^2}$$

Als Spezialfall der Norm definieren wir die Maximumsnorm als Grenzwert der p-Norm

$$\|x\|_p := (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$$

für $p \to \infty$ wie folgt:

$$\|x\|_\infty := \max(|x_1|, \ldots, |x_d|)$$

1.2 Grundlagen der Selbstvermeidenden Irrfahrten

Definition 6. *(Einfache) gewöhnliche Irrfahrt*
Sei $\Omega \subset \mathbb{Z}^d$ die Menge der möglichen Schritte ausgehend von einem beliebigen Startpunkt $x_0 \in \mathbb{Z}^d$. Betrachte nun die Mengen

(1) *nächste Nachbarn: $\Omega = \{x \in \mathbb{Z}^d : \|x - x_0\|_1 = 1\}$*

(2) *Verteilungen: $\Omega = \{x \in \mathbb{Z}^d : 0 < \|x - x_0\|_\infty \leq L\}$*

wobei L eine feste natürliche Zahl ist. Ein n-schrittiger Weg ist eine Sequenz $\omega = (\omega(0), \omega(1), \ldots, \omega(n))$ mit $\omega(j) - \omega(j-1) \in \Omega$ für $j = 1, \ldots, n$. Die n-schrittige einfache Irrfahrt ist das Einheitsmaß der n-schrittigen gewöhnlichen Irrfahrt. Die Länge $|\omega|$ der Irrfahrt ω ist die Anzahl der Elemente der Folge ω abzüglich eins. Eine Irrfahrt heißt selbstvermeidend, wenn zusätzlich die Eigenschaft $\omega(i) \neq \omega(j), \forall i, j \in \{0, \ldots, N\}$ mit $i \neq j$ erfüllt ist.Wir definieren die Mengen

(1) $\mathcal{W}_n(0,x) = \{\omega : \omega$ *ist ein n-schrittiger Weg mit* $\omega(0) = 0$ *und* $\omega(n) = x\}$

(2) $\mathcal{W}_n = \bigcup_{x \in \mathbb{Z}^d} \mathcal{W}_n(0,x)$

Definition 7. *Self-avoiding walks*
Wir betrachten schwache selbstvermeidende Irrfahrten und strikte selbstvermeidende Irrfahrten. Gegeben sei ein n*-schrittiger Weg* $\omega \in \mathcal{W}_n$*, und natürliche Zahlen* $s, t \in \mathbb{N}$ *mit* $0 \leq s < t \leq n$*. Definiere*

$$U_{s,t}(\omega) = \begin{cases} -1, & \text{wenn } \omega(s) = \omega(t), \\ 0, & \text{wenn } \omega(s) \neq \omega(t) \end{cases} .$$

Wir ordnen jedem Weg $\omega \in \mathcal{W}_n$ *den Gewichtungsfaktor*

$$\prod_{0 \leq s < t \leq n} (1 + \lambda U_{s,t}(\omega))$$

für feste $\lambda \in [0,1]$ *zu.*

Mit den Gewichten folgt für die zugehörigen Partitionssummen $c_n^{(\lambda)}(x)$ *und* $c_n^{(\lambda)}$ *für Irrfahrten in* $\mathcal{W}_n(0,x)$ *und* $\mathcal{W}_n$

$$c_n^{(\lambda)}(x) = \sum_{\omega \in \mathcal{W}_n(0,x)} \prod_{0 \leq s < t \leq n} (1 + \lambda U_{s,t}(\omega))$$

und

$$c_n^{(\lambda)} = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} c_n^{(\lambda)}(x)$$

Im Fall $\lambda = 1$ *zählt* $c_n^{(1)}(x)$ *die Anzahl aller selbstvermeidenden Irrfahrten der Länge* n*, die in* $x \in \mathbb{Z}^d$ *enden und* $c_n^{(1)}$ *die Anzahl aller selbstvermeidenden Irrfahrten der Länge* n *unabhängig vom Endpunkt.*
Weiter definieren wir Wahrscheinlichkeitsmaße $\mathbb{Q}_n^{(\lambda)}$ *auf* $\mathcal{W}_n$ *mit Erwartungswerten* $\mathbb{E}_n^{(\lambda)}$ *wie folgt:*

$$\mathbb{Q}_n^{(\lambda)}(A) = \frac{1}{c_n^{(\lambda)}} \sum_{\omega \in A} \prod_{0 \leq s < t \leq n} (1 + \lambda U_{s,t}(\omega)) \quad (A \subset \mathcal{W}_n)$$

$$\mathbb{E}_n^{(\lambda)}(X) = \frac{1}{c_n^{(\lambda)}} \sum_{\omega \in \mathcal{W}_n} X(\omega) \prod_{0 \leq s < t \leq n} (1 + \lambda U_{s,t}(\omega)) \quad (X : \mathcal{W}_n \to \mathbb{R})$$

Satz 8. *Im* $\mathbb{Z}^d$ *gilt:*

$$d^N \leq c_{N,d}^{(\lambda)} \leq 2d(2d-1)^{N-1}$$

Beweis. Die obere Schranke erhalten wir durch alle gewöhnlichen Irrfahrten ω der Länge N für die $\omega(i) \neq \omega(i+2), i = 0, \ldots, N-2$ gilt. Im $\mathbb{Z}^d$ gibt es somit genau $2d(2d-1)^{N-1}$ mögliche Wege, da im ersten Schritt $2d$ Möglichkeiten und in jedem weiteren Schritt $2d-1$ Möglichkeiten vorhanden sind. Die Abschätzung nach oben betrachtet auch nicht-selbstvermeidende Irrfahrten. Die untere Schranke ist gegeben durch die Anzahl aller d-dimensionalen positiven Richtungen, welche offensichtlich selbstvermeidend sind. $\square$

Definition 9. *Die Verkettung $\omega = \omega^{(1)} \circ \omega^{(2)}$ einer selbstvermeidenden Irrfahrt $\omega^{(1)}$ der Länge N mit einer selbstvermeidenden Irrfahrt $\omega^{(2)}$ der Länge M ist eine Irrfahrt ω der Länge $N+M$, welche im Allgemeinen nicht selbstvermeidend ist. Die Irrfahrt ω ist durch*

$$\omega(k) := \omega^{(1)}(k) \text{ für alle } k = 0, \dots, N$$
$$\omega(k) := \omega^{(1)}(N) + \omega^{(2)}(k-N) - \omega^{(2)}(0) \text{ für alle } k = N+1, \dots, N+M$$

definiert.

Lemma 10. *Für die Anzahl selbstvermeidender Irrfahrten $c^{(\lambda)}$ gilt*

$$c_{N+M}^{(\lambda)} \leq \sum_{\omega \in \mathcal{W}_{N+M}} \prod_{0 \leq s < t \leq N} (1 + \lambda U_{s,t}(\omega)) \prod_{N \leq s' < t' \leq N+M} (1 + \lambda U_{s',t'}(\omega)) \leq c_N^{(\lambda)} \cdot c_M^{(\lambda)}$$

Beweis. Das Produkt $c_N \cdot c_M$ gibt die Anzahl aller möglichen Irrfahrten der Länge $N+M$ an, wobei die ersten N und die letzten M Schritte jeweils selbstvermeidend sind. Die gesamte Irrfahrt muss hierbei nicht selbstvermeidend sein, woraus die Ungleichung folgt. □

1.3 Bindungskonstante

Definition 11. *Die Bindungskonstante ist definiert als Grenzwert*

$$\mu_\lambda := \lim_{N \to \infty} (c_N^{(\lambda)})^{1/N}$$

Satz 12. *Die Bindungskonstante*

$$\mu_\lambda := \lim_{N \to \infty} (c_N^{(\lambda)})^{1/N}$$

existiert.

Zeige zunächst:

Lemma 13. *Seien $I \neq \emptyset$ eine Indexmenge und $a_i \in \mathbb{R} \; \forall \, i \in I$, sodass $a_{n+m} \leq a_n + a_m$ für alle $n, m \in I$. Dann ist der Grenzwert $\lim_{n \to \infty} a_n n^{-1}$ konvergent und es gilt*

$$\lim_{n \to \infty} \frac{a_n}{n} = \inf_{n \geq 1} \frac{a_n}{n} \in (-\infty, \infty) \tag{1}$$

Beweis. Wegen der Subadditivität folgt die Konvergenz von $a_n n^{-1}$ für $n \to \infty$. Wir zeigen zunächst, dass für ein festes k

$$\lim_{n \to \infty} \frac{a_n}{n} \leq \frac{a_k}{k}, \; k \geq 1 \tag{2}$$

gilt. Für das k definieren wir

$$A_k := \max_{1 \leq r \leq k} a_r$$

Weiter sei $n = jk + r$ für $1 \leq r \leq k$. Mit der Subadditivität erhalten wir

$$a_n = a_{jk+r} \leq a_{jk} + a_r \leq ja_k + a_r \leq \frac{n}{k} a_k + A_k$$

Mit Division durch n und der Betrachtung des Grenzwertes für $n \to \infty$ folgt Gleichung (2). Durch Bildung des Infimums, also der kleinsten oberen Schranke, folgt Gleichung (1). $\square$

Beweise nun Satz 13:

Beweis. Mit Lemma 14 folgt

$$\log c_{N+M}^{(\lambda)} \leq \log c_N^{(\lambda)} c_M^{(\lambda)} = \log c_N^{(\lambda)} + \log c_M^{(\lambda)}$$

was bedeutet, dass die Folge $\{\log c_N^{(\lambda)}\}_{N \geq 1}$ die Eigenschaft der Subadditivität erfüllt. Durch Anwendung von Lemma erhalten wir

$$\log \mu_\lambda = \lim_{N \to \infty} \frac{\log c_N^{(\lambda)}}{N} = \inf_{N \geq 1} \frac{\log c_N^{(\lambda)}}{N} \tag{3}$$

woraus die Existenz der Bindungskonstante folgt. $\square$

Bemerkung 14. *Aus Gleichung (3) folgt durch Potenzieren die Abschätzung*

$$\mu_\lambda^N \leq c_N^{(\lambda)}$$

Lemma 15. *Es gilt:*

$$d \leq \mu \leq 2d - 1$$

Beweis. Anwendung von Satz 9 und Definition 14. $\square$

1.4 Ausblick

Offensichtlich ist die exakte Anzahl der selbstvermeidenden Irrfahrten $c_N^{(\lambda)}$ von besonderem Interesse. Da scheinbar keine einfache Lösung des Problems existiert, sind untergeordnete Probleme wie die Abschätzung von $c_N^{(\lambda)}$ oder die Bestimmung von Bindungskonstanten in ähnlichen Gittern wie dem hexagonalen Gitter von Interesse.

1.4.1 Kritische Exponenten

Um die Anzahl selbstvermeidender Irrfahrten besser abschätzen zu können wird eine gleich-stark wachsende Abbildung betrachtet, welche allerdings noch unbekannte Parameter enthält - die sogenannten kritischen Exponenten. Es wird vorhergesagt, dass für jedes d eine Konstante γ existiert, sodass für alle $\lambda \in (0, 1]$ und für das nearest-neighbour-model und das spread-out-model gilt:

Vermutung 16. *Seien $d \in \mathbb{N}$ und $\lambda \in (0,1]$. Dann existiert eine Konstante $\gamma \in \mathbb{R}$, sodass gilt:*

$$c_N^{(\lambda)} \sim A_\lambda \mu_\lambda^N N^{\gamma-1}$$

Satz 17. *Für alle $d \geq 2$ gilt*

$$\mu^N \leq c_N \leq \mu^N e^{\kappa\sqrt{N}}$$

Diese Aussage wurde von Hammersly und Welsh im Jahr 1962 bewiesen [4]. Ein Jahr später wurde die Abschätzung der oberen Schranke von Kesten zu

$$c_N \leq \mu^N e^{\kappa n^{2/(d+2)} \log n}$$

verbessert [3].

1.4.2 Bindungskonstante im hexagonalen Gitter

Für das hexagonale Gitter wurde bereits im Jahr 2010 ein exakter Wert der Bindungskonstante von Duminil-Copin und Bauerschmidt berechnet.

Satz 18. *Im hexagonalen Gitter gilt für die Bindungskonstante selbstvermeidender Irrfahrten*

$$\mu = \sqrt{2+\sqrt{2}}.$$

Der Beweis ist allerdings sehr umfangreich und eine Aufführung würde den Rahmen des Seminars und der Ausarbeitung weit überschreiten [2].

Literatur

[1] Dörn, Sebastian (2004): *Selbstvermeidende Irrfahrten*, Hochschule Mittweida

[2] Duminil-Copin, Hugo, Roland Bauerschmidt, Jesse Goodman und Gordon Slade (2010): *Lectures on Self-Avoiding Walks*, in: Ellwood, David, Charles Newman, Vladas Sidoravicius, Wendelin Werner: Probability and Statistical Physics in Two and More Dimensions

[3] Kesten, Harry (1963): On the number of self-avoiding walks, J. Math. Phys.

[4] Guttmann, Anthony J. (2012): Self-Avoiding Walks and Polygons - An Overview, Asia Pacific Mathematics Newsletter unter: `https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=18&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwizk6D4yIbnAhXD-6QKHVgXDkUQFjARegQIBxAC&url=https%3A%2F%2Fwww.asiapacific-mathnews.com%2F02%2F0204%2F0001_0010.pdf&usg=AOvVaw1IFnomHmkc53ha92R5_Z8J`

[5] Wilhelm, Isaac Ottoni (2009): Counting Self-Avoiding Walks of Length N, University of Chicago unter: `https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&ved=2ahUKEwiurMWVzIbnAhV8WhUIHSEuAHsQFjAAegQIARAC&url=http%3A%2F%2Fwww.math.uchicago.edu%2F~may%2FVIGRE%2FVIGRE2009%2FREUPapers%2FWilhelm.pdf&usg=AOvVaw0tGC1AR86t_nDqPKHPiIvg`