



Universiteit  
Leiden  
The Netherlands

## Zelfmijdende Wandelingen

Offergelt, F.H.S.

### Citation

Offergelt, F. H. S. (2008). *Zelfmijdende Wandelingen*.

Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [License to inclusion and publication of a Bachelor or Master thesis in the Leiden University Student Repository](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/3596852>

**Note:** To cite this publication please use the final published version (if applicable).

# **Zelfmijdende Wandelingen**

**Bachelorscriptie F.H.S. Offergelt**

Onder begeleiding van:  
Prof.Dr. W.Th.F. den Hollander

**Universiteit Leiden**

**24 juni 2008**

# Inleiding

Een wandelaar start een wandeling op een regelmatig rooster. Hij begint in een willekeurig gekozen punt en kan zich verplaatsen naar al zijn directe buren. De enige beperking die de wandelaar heeft is dat hij nooit terug mag keren naar een punt waar hij al geweest is. De wandeling moet zelfmijdend zijn.

**Definitie 1.1** *Een  $n$ -staps zelfmijdende wandeling op  $\mathbb{Z}^d$  startend in punt  $x$  wordt gedefinieerd als een rij punten  $(\omega(0), \omega(1), \dots, \omega(n))$  met  $\omega(0) = x$  die voldoet aan  $|\omega(j+1) - \omega(j)| = 1$  en  $\omega(i) \neq \omega(j)$  voor alle  $0 \leq j < i \leq n$ .*

Deze op het eerste gezicht vrij eenvoudige wandeling, geeft aanleiding tot wiskundig moeilijke vragen. Er zijn twee hoofdvragen:

1. Hoeveel zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen zijn er?
2. Hoe ver is een wandelaar gemiddeld van zijn startpunt na een wandeling van  $n$  stappen?

Er is veel onderzoek gedaan om een antwoord op deze twee vragen te kunnen vinden. De artikelen en boeken die de resultaten van dit onderzoek beschrijven zijn op PhD niveau geschreven. In deze scriptie wordt zodanig antwoord gegeven op de vragen dat een bachelor student het kan begrijpen. Hierbij worden sommige methoden uitgewerkt, terwijl van sommige methoden slechts de resultaten genoemd worden.

In het eerste hoofdstuk wordt de geschiedenis van de zelfmijdende wandelingen behandeld. Aan bod komen: waarom is dit probleem interessant, wat is er tot nu toe bekend en wie heeft hieraan een bijdrage geleverd?

Hoofdstuk twee gaat in op de eerste vraag: Hoeveel zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen zijn er? Dit is een combinatorische probleem. Er wordt verteld wat er allemaal bekend is over de oplossing van het probleem.

Hoofdstuk drie behandelt de tweede vraag: Hoe ver is een wandelaar gemiddeld van zijn startpunt na een wandeling van  $n$  stappen. In tegenstelling tot het eerste probleem is dit een stochastisch probleem. Er zal uitgelegd worden wat er precies bedoeld wordt met de vraag en in hoeverre er een antwoord op bekend is.

Hierna wordt ingegaan op de numerieke methoden die zijn ontwikkeld om bovenstaande vragen te beantwoorden.

Tenslotte komen in het laatste hoofdstuk twee andere wandelingen aan bod, die nauw verwant zijn aan de zelfmijdende wandeling. Dit zijn de Lus-uitwissende zelfmijdende wandeling en de Bijziende zelfmijdende wandeling.

# Inhoudsopgave

<b>1</b>	<b>Geschiedenis</b>	<b>3</b>
1.1	Polymeren . . . . .	3
1.2	Wiskundige start . . . . .	4
1.3	Kritieke exponenten . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Het aantal zelfmijdende wandelingen</b>	<b>7</b>
2.1	Connectiviteitsconstante . . . . .	9
2.2	Grenzen voor de connectiviteitsconstante . . . . .	13
2.2.1	Eenvoudige grenzen . . . . .	13
2.2.2	Ondergrenzen . . . . .	14
2.2.3	Bovengrenzen . . . . .	17
<b>3</b>	<b>De spreiding van de stochastische zelfmijdende wandeling</b>	<b>21</b>
3.1	De gemiddelde kwadratische afstand . . . . .	21
3.2	Fisher-Flory argument . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Numerieke methoden</b>	<b>30</b>
4.1	Monte Carlo methoden . . . . .	30
4.2	Monte Carlo Markov Keten . . . . .	32
4.3	Pivot algoritme . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Andere typen wandelingen</b>	<b>40</b>
5.1	Lus-uitwissende wandelingen . . . . .	40
5.2	Bijziende zelfmijdende wandeling . . . . .	42
	<b>Conclusie</b>	<b>44</b>
	<b>Bibliografie</b>	<b>45</b>

# Hoofdstuk 1

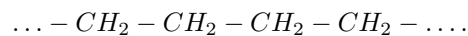
## Geschiedenis

Ongeveer halverwege de twintigste eeuw is het onderzoek naar zelfmijdende wandelingen begonnen. Het was geen wiskundige die de eerste resultaten heeft geboekt op dit gebied, maar een scheikundige: Paul John Flory (9 juni 1910 - 9 september 1985). Deze Amerikaanse scheikundige is onder andere bekend geworden vanwege zijn werk op het gebied van polymeren. In 1974 won Flory de Nobelprijs voor de scheikunde voor zijn bijdragen, zowel theoretisch als experimenteel, in de fysische chemie van macromoleculen.

Zelfmijdende wandelingen zijn een goed model voor polymeerketens. Om dit te verduidelijken wordt allereerst het een en ander verteld over polymeren.

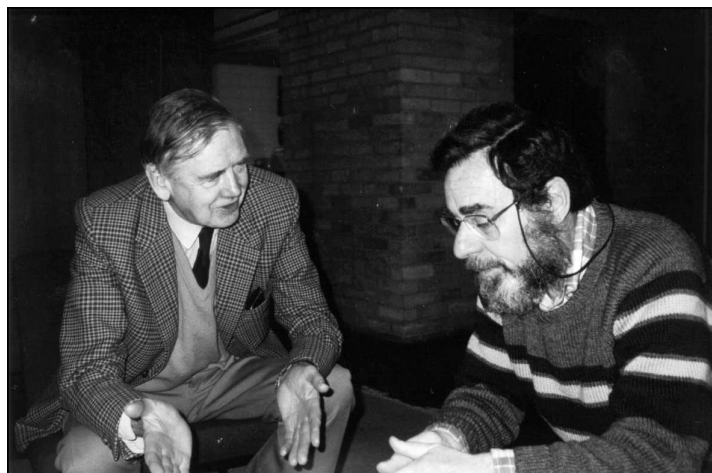
### 1.1 Polymeren

Een polymeer is een molecuul dat bestaat uit vele kleinere moleculen die bij elkaar gehouden worden door chemische verbindingen. Het aantal chemische verbindingen dat een molecuul aangaat met andere moleculen wordt de functionaliteit genoemd. Dus als een molecuul functionaliteit twee heeft dan is het polynoom lineair. Polyetheen (voorheen polyethyleen genoemd) is een voorbeeld van een lineair polymeer. Dit polymeer ziet er als volgt uit:



Lineaire polynomen kunnen heel erg groot worden, sommige polymeren bestaan uit meer dan  $10^5$  moleculen.

Om het verband te zien tussen zelfmijdende wandelingen en polymeren, moet gekeken worden naar de topologische structuur van de polymeren. Bekijk hiervoor een lineair polymeer bestaande uit  $n + 1$  moleculen in  $\mathbb{R}^3$ . De plaats van het  $i$ -de molecuul ( $0 \leq i \leq n$ ) wordt aangegeven met  $x(i) \in \mathbb{R}^3$ . De chemische verbinding tussen de twee moleculen wordt aangegeven met het lijnstuk dat  $x(i - 1)$  en  $x(i)$  verbindt. Hierbij is elk lijnstuk even lang. En de hoek tussen elk paar opeenvolgende molecuul-molecuul verbindingen is ook overal even groot. De rotatiehoek van de  $i$ -de verbinding ten opzichte van de  $(i - 1)$ -de verbinding kan wel verschillen. De verbindingen liggen dus niet allemaal in een rechte lijn



Figuur 1.1: John Hammersley en Harry Kesten, Oxford University, 1993.

of in hetzelfde vlak.

Een vrije wandeling (een wandeling waarbij zelfdoorsnijding is toegestaan) in  $\mathbb{R}^3$  kan dus een model zijn voor de topologische structuur van een polymeer. En dit kan op zijn beurt weer benaderd worden door een vrije wandeling in  $\mathbb{Z}^3$  te bekijken. Maar in de praktijk is een vrije wandeling geen goede benadering voor de structuur van een polymeer. Dit komt omdat het niet mogelijk is dat een molecuul dichtbij een ander molecuul komt. Hierdoor kunnen twee moleculen niet dezelfde positie in de ruimte bezetten. Een zelfmijdende wandeling is een beter model dan een vrije wandeling. Numerieke methoden suggereren dat de zelfmijdende wandeling en lineaire polymeren dezelfde "kritieke exponenten" hebben. Bekijk bijvoorbeeld de gemiddelde afstand van een molecuul tot het zwaartepunt van het polymeer. Deze afstand gedraagt zich asymptotisch als  $Dn^\nu$  voor  $n \rightarrow \infty$ , waar  $n$  het aantal moleculen aangeeft. Het blijkt dat de kritieke exponent  $\nu$ , die aangeeft hoe ver een zelfmijdende wandeling van  $n$  stappen gemiddeld van de oorsprong is verwijderd, dezelfde exponent is als die van een polymeer.

Paul John Flory heeft in 1949 [5] een methode ontwikkeld om deze exponent  $\nu$  te bepalen. Hierover wordt in hoofdstuk 3.2 meer verteld. Flory was dus de eerste die zich met precieze berekeningen op het gebied van zelfmijdende wandelingen bezighield.

## 1.2 Wiskundige start

De eerste belangrijke wiskundige resultaten op dit gebied hebben we te danken aan John Michael Hammersley (21 maart 1920 - 2 mei 2004). Hammersley hield zich voornamelijk bezig met de vraag: hoeveel zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen zijn er? Omdat het berekenen van dit exacte aantal nogal lastig

is en tot op de dag van vandaag onopgelost (zie hoofdstuk 2), wordt gekeken naar het asymptotisch gedrag van het aantal zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen  $c_n$  als  $n \rightarrow \infty$ . Er blijkt een  $\mu$  te bestaan zodanig dat  $c_n \approx \mu^n$  als  $n \rightarrow \infty$  waarbij later toegelicht wordt in welke zin  $\approx$  een benadering is. Hammersley heeft het bewijs geleverd voor het bestaan van  $\mu$  [7]. Hij deed dit samen met Bill Morton met behulp van het subadditiviteitslemma (zie hoofdstuk 2.1). Hammersley heeft ook geprobeerd grenzen te bepalen voor  $\mu$ . Samen met zijn student Dominique Welsh bewees hij uiteindelijk dat op  $\mathbb{Z}^d$

$$(2d - 1) - \log(2d - 1) \leq \mu \leq (2d - 1),$$

waar  $d$  de dimensie van het rooster is. Dit was niet het eerste resultaat dat op het gebied van de connectiviteitsconstante gevonden is. De eerste poging om niet-triviale grenzen voor  $c_n$  te vinden is door Frisch et al. (1951) gedaan, met behulp van de technieken van Montroll (1950). Rond deze tijd vond Wakefield (1952) de ondergrens  $\mu = 2.47$  voor  $\mathbb{Z}^2$ . In 1959 vonden Fisher en Sykes [4], met behulp van twee verschillende methoden, een bovengrens en een ondergrens voor  $\mu$ .

Hierna vonden Hammersley en Welsh hun grens. Deze werd in 1964 verbeterd door Harry Kesten [12]. Hij bewees dat

$$\mu = (2d - 1) - (2d)^{-1} + O(d^{-2}) \quad \text{voor } d \rightarrow \infty.$$

Deze waarde voor  $\mu$  is heel lang de beste gebleven. Pas in 1993 hebben Hara en Slade [9] deze grens verbeterd. Door middel van een combinatorische approximatie techniek die lace expansie heet vonden zij

$$\mu = (2d - 1) - (2d)^{-1} - 3(2d)^{-2} + O(d^{-3}) \quad \text{voor } d \rightarrow \infty. \quad (1.2.1)$$

Brydges en Spencer (1985) [1] hebben de lace expansie geïntroduceerd. Zij gebruikten de methode om de zwakke zelfmijdende wandelingen (zie hoofdstuk 3.2) te bestuderen in  $d > 4$ . De lace expansie is een basistechniek die steunt op de gedachte dat een zelfmijdende wandeling een perturbatie is van een vrije wandeling, omdat in hoge dimensies een wandeling zichzelf niet vaak doorsnijdt.

De beste bovengrens voor  $\mu$  is door Alm (1992) [17] bepaald en de beste ondergrens in 2 dimensies hebben Conway en Guttmann (1993) gevonden [3]. De methoden waarmee zij dit gedaan hebben worden beschreven in hoofdstuk 2. Hara en Slade [9] hebben de beste asymptotiek voor  $\mu$  in  $d \geq 3$  bepaald. Zij gebruiken hiervoor Lus-uitwissende zelfmijdende wandelingen. De exacte methode wordt niet behandeld. Wel wordt in hoofdstuk 5.1 beschreven wat een Lus-uitwissende zelfmijdende wandeling is.

Nathan Clisby en Gordon Slade hebben doormiddel van lace expansie in zeer veel dimensies waarden gevonden voor  $c_n$  [2]. De grens voor  $\mu$  hebben zij in meer termen geëxpandeerd dan vergelijking (1.2.1).

### 1.3 Kritieke exponenten

Hammersley en Morton bewezen dat  $c_n \approx \mu^n$ . Door natuurkundigen is algemeen geaccepteerd dat  $c_n \approx A\mu^n n^{\gamma-1}$ , waarbij  $\gamma$  net als  $\nu$  een kritieke exponent is.

Dit asymptotisch gedrag is niet bewezen. Wel heeft Slade (1989) bewezen dat  $c_n \approx A\mu^n$  voor  $d$  groot. En Hara en Slade (1992a en 1992b) [8] hebben door middel van de bovengenoemde lace expansie bewezen dat voor  $d \geq 5$

$$c_n = A_d \mu^n [1 + O(n^{-\epsilon})],$$

waarbij  $A_d$  onafhankelijk is van  $n$  en  $\epsilon < \frac{1}{2}$ .

Voor de kritieke exponent  $\gamma$  en de kritieke exponent  $\nu$  zijn waarden gevonden [15].

- $d = 2$ 
  - Nienhuis (1982, 1984 en 1987) heeft waarden gevonden voor  $\gamma$  en  $\nu$ , namelijk  $\gamma = 43/32$  en  $\nu = 3/4$ . Deze waarden vond Nienhuis door gebruik te maken van plausibele maar niet-rigoreuze model-analogieën.
  - Duplantier (1989, 1990) vond een alternatieve benadering voor  $\gamma$  en  $\nu$  doormiddel van conforme invariantie en expansie technieken.
  - De meest recente resultaten in  $d = 2$  hebben we te danken aan Lawler, Schramm en Werner. Zij hebben aangetoond dat, wanneer de "schalingslimiet" van de zelfmijdende wandelingen "conform invariant" is, de waarden van  $\gamma$  en  $\nu$  gevonden door Nienhuis en Duplantier exact zijn.
- $d = 3$ 
  - Le Guillou en Zinn-Justin (1989) hebben door middel van lichaam-theoretische berekeningen waarden gevonden voor de kritieke exponenten.
  - Madras en Sokal deden dit door middel van Monte Carlo methoden (hoofdstuk 4.1)
  - Guttmann en Wang (1991) hebben ook door middel van numerieke methoden waarden gevonden. Dit deden ze met behulp van extrapolatie technieken
  - Duplantier heeft numeriek bepaald dat  $\nu = 1.162 \pm 0.002$ .
- $d = 4$ 
  - Logaritmische correcties voor de waarden van  $\gamma$  en  $\nu$  zijn bepaald door Larkin en Khmel' Nitskii (1969), Wegner en Riedel (1973) en Brezin, Le Guillou en Zinn-Justin (1973).
  - Recente resultaten kunnen gevonden worden in Brydges, Evans en Imbrie (1992) en Arnoudon, Iagolnitzer en Magnen (1991)
- $d \geq 5$ 
  - Hara en Slade (1992a,1992b) hebben bewezen dat de kritieke exponenten bestaan voor deze dimensies en gelijk zijn aan  $\nu = 1/2$  en  $\gamma = 1$ .

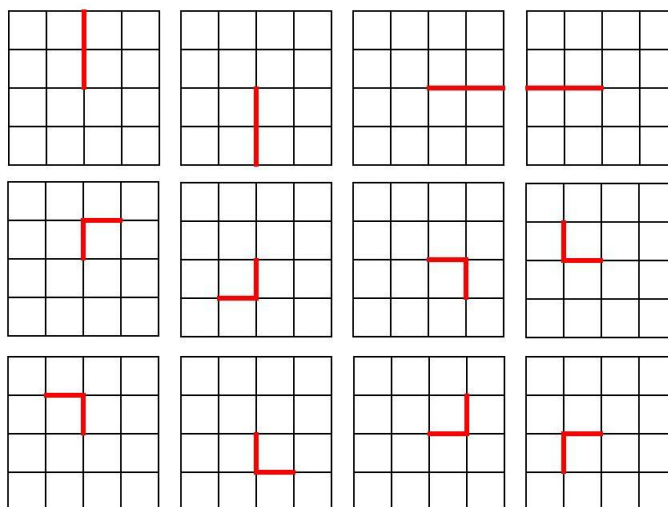


## Hoofdstuk 2

# Het aantal zelfmijdende wandelingen

Het antwoord op de vraag hoeveel zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen er zijn op een regelmatig rooster, is niet gemakkelijk te geven. Er zijn nog geen methoden bekend om deze vraag exact te beantwoorden. De vraag kan echter wel beantwoord worden voor bepaalde triviale gevallen. Neem het probleem in één dimensie: het aantal zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen zal voor alle  $n$  gelijk aan twee zijn. Namelijk, kies vanuit de oorsprong één van de twee richtingen en vervolgens kan alleen deze richting aangehouden worden, anders is de wandeling niet zelfmijdend.

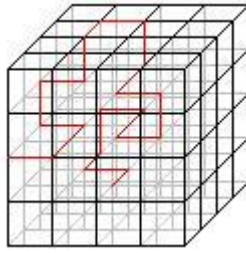
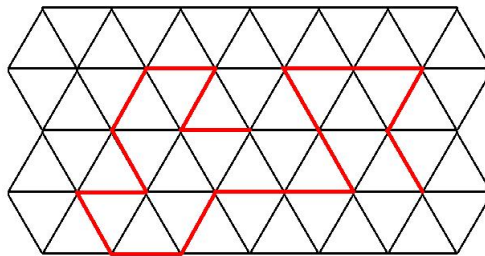
Voor hogere dimensies ontstaan problemen. Bekijk het 2-dimensionale vierkantsrooster  $\mathbb{Z}^2$ . In dit rooster kunnen in totaal 4 verschillende zelfmijdende wandelingen van 1 stap gemaakt worden: één stap naar boven, één stap naar beneden, één stap naar links en één stap naar rechts. Het aantal wandelingen van 2 stappen is evenzo gemakkelijk te bepalen. Vanuit elke zelfmijdende wandeling van 1 stap kan er in drie richtingen een stap gedaan worden zonder in hetzelfde punt terug te keren. Er zijn dus  $4 \times 3 = 12$  zelfmijdende wandelingen van 2 stappen (zie figuur 2.1). Op dezelfde manier wordt het aantal zelfmijdende wandelingen van 3 stappen gevonden. Vanuit elke 2-staps wandeling kan in drie richtingen een stap gedaan worden zonder in een punt te komen waar de wandeling al geweest is. Dit geeft in totaal  $12 \times 3 = 36$  zelfmijdende wandelingen van 3 stappen. Maar als de wandeling langer dan 3 stappen is, wordt de situatie anders. Nu komt de wandeling zichzelf niet alleen tegen als hij omkeert, maar ook door een rondje te lopen. Na 4 stappen, kan de wandeling precies terugkomen in het punt waar hij startte. Er zijn dus meer beperkingen. Het aantal zelfmijdende wandelingen van 4 stappen is niet  $3 \times 36 = 108$ , maar minder, namelijk 100. In de onderstaande tabel staat een aantal resultaten dat tot nu toe gevonden is voor  $\mathbb{Z}^2$  (hier geeft  $n$  het aantal stappen aan en  $c_n$  geeft het aantal zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen).

Figuur 2.1: Alle 2-staps zelfmijdende wandelingen in  $\mathbb{Z}^2$ .

$n$	$c_n$	$n$	$c_n$
0	1	20	897697164
1	4	21	2408806028
2	12	22	6444560484
3	36	23	17266613812
4	100	24	46146397316
5	284	25	123481354908
6	780	26	329712786220
7	2172	27	881317491628
8	5916	28	2351378582244
9	16268	29	6279396229332
10	44100	30	16741957935348
11	120292	31	44673816630956
12	324932	32	119034997913020
13	881500	33	317406598267076
14	2374444	34	845279074648708
15	6416596	35	2252534077759844
16	17245332	36	5995740499124412
17	46466676	37	15968852281708724
18	124658732	38	42486750758210044
19	335116620	39	113101676587853932

Het aantal zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen op  $\mathbb{Z}^2$  is berekend tot  $n = 71$  en het aantal zelfmijdende wandelingen op  $\mathbb{Z}^3$  is berekend tot  $n = 32$ .

Er zijn ook resultaten geboekt op roosters van een andere vorm, bijvoorbeeld het driehoeksrooster (zie figuur 2.3) of honingraadrooster. De enige eis waar het rooster aan moet voldoen is dat het homogeen is. Dit wil zeggen dat het rooster invariant is onder translatie, zodat het aantal wandelingen van  $n$  stappen onafhankelijk is van het punt waar de wandeling start. Elk punt heeft

Figuur 2.2: Een zelfmijdende wandeling in  $\mathbb{Z}^3$ .

Figuur 2.3: Een zelfmijdende wandeling in het driehoeksrooster.

dan evenveel burenen. Onderstaande tabel geeft de resultaten die gevonden zijn voor het driehoeksrooster.

$n$	$c_n$
0	1
1	6
2	30
3	138
4	618
5	2730
6	11946
7	51882
8	224130
9	964134
10	4133166

## 2.1 Connectiviteitsconstante

Omdat het berekenen van het aantal zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen niet gemakkelijk is, wordt naar het asymptotisch gedrag voor  $n \rightarrow \infty$  gekeken. Het aantal wandelingen van  $n$  stappen die niet zelfmijdend hoeven te zijn, de zogenaamde vrije wandelingen, is gemakkelijk te berekenen. Dit aantal is gelijk

aan

$$z^n,$$

waarbij  $z$  het aantal bindingen is vanuit een roosterpunt. Het getal  $z$  wordt ook wel het coördinaatsgetal genoemd en is voor elk roosterpunt hetzelfde, aangezien het rooster homogeen is. Nu blijkt er een analoog resultaat te zijn voor zelfmijdende wandelingen. Het aantal zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen,  $c_n$ , wordt beschreven door

$$c_n \approx \mu^n, \quad (2.1.1)$$

waarbij  $\mu$  een constante is die van het rooster afhangt. De constante  $\mu$  wordt de connectiviteitsconstante van het rooster genoemd. Dat deze constante daadwerkelijk bestaat is bewezen door Hammersley en Morton (1954). Zij maken in dit bewijs gebruik van het subadditieve rijen lemma, waarvan hieronder het bewijs gegeven wordt.

**Lemma 2.1.1** *Het subadditieve rijen lemma*

Stel dat  $a_n, n \in \mathbb{N}$  een rij niet-negatieve getallen is die voldoet aan de subadditieve ongelijkheid:

$$a_{m+n} \leq a_m + a_n \quad \text{voor alle } m, n \in \mathbb{N} \quad (2.1.2)$$

Dan geldt:

1.  $\kappa = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n}$  bestaat.
2.  $\frac{a_n}{n} \geq \kappa$  voor alle  $n \in \mathbb{N}$ .

*Bewijs.* De rij  $(a_n)$  is een rij niet-negatieve getallen dus is de rij  $(\frac{a_n}{n})$  naar onder begrensd door 0. Deze rij  $(\frac{a_n}{n})$  heeft dus een grootste ondergrens, het infimum. Definieer dit infimum als  $\kappa$

$$\kappa = \inf_{n \in \mathbb{N}} \frac{a_n}{n}.$$

Aangezien  $\kappa$  de grootste ondergrens is, bestaat er voor willekeurige  $\epsilon > 0$  een  $m$  zodanig dat

$$\frac{a_m}{m} < \kappa + \epsilon. \quad (2.1.3)$$

Kies voor deze  $m$  bij elke  $n \in \mathbb{N}$  een  $k = k(n) \in \mathbb{N}$  zodanig dat  $(k+1)m \leq n \leq (k+2)m$ . Er geldt

$$\kappa \leq \frac{a_n}{n} \leq \frac{a_{km}}{n} + \frac{a_{n-km}}{n} \quad \text{voor alle } n \in \mathbb{N}$$

vanwege de subadditieve ongelijkheid (2.1.2). Vanwege dezelfde ongelijkheid geldt vervolgens:

$$\kappa \leq k \frac{a_m}{n} + \frac{a_{n-km}}{n} \quad \text{voor alle } n \in \mathbb{N}.$$

Vanwege de ongelijkheid (2.1.3) geldt nu

$$\kappa \leq \frac{km(\kappa + \epsilon)}{n} + \frac{a_{n-km}}{n} \quad \text{voor alle } n \in \mathbb{N}. \quad (2.1.4)$$

Het interval  $(k+1)m \leq n \leq (k+2)m$  kan geschreven worden als  $m \leq n - km \leq 2m$ . Dus de term  $a_{n-km}$  zal kleiner dan of gelijk zijn aan  $\max(a_m, a_{m+1}, \dots, a_{2m})$ . En vanwege  $km + m \leq n$  geldt dat  $\frac{km}{n} < 1$ , daarom is  $\frac{km(\kappa + \epsilon)}{n}$  kleiner dan  $\kappa + \epsilon$ . De ongelijkheid (2.1.4) kan dus nu als volgt herschreven worden:

$$\kappa \leq \frac{a_n}{n} \leq \kappa + \epsilon + \frac{\max(a_m, a_{m+1}, \dots, a_{2m})}{n} \quad \text{voor alle } n \in \mathbb{N}.$$

Als nu de limiet  $n \rightarrow \infty$  genomen wordt, dan is het resultaat

$$\kappa \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \leq \kappa + \epsilon. \quad (2.1.5)$$

Dus de rij  $\frac{a_n}{n}$  ligt op den duur tussen  $\kappa$  en  $\kappa + \epsilon$  met  $\epsilon > 0$  willekeurig. ■

Met behulp van het lemma kan een bewijs gegeven worden voor het bestaan van de connectiviteitsconstante. Hammersley en Morton [7] hebben de stelling als volgt geformuleerd:

### Stelling 2.1.2 Hammersley en Morton

Neem aan dat een rooster aan de volgende voorwaarden voldoet:

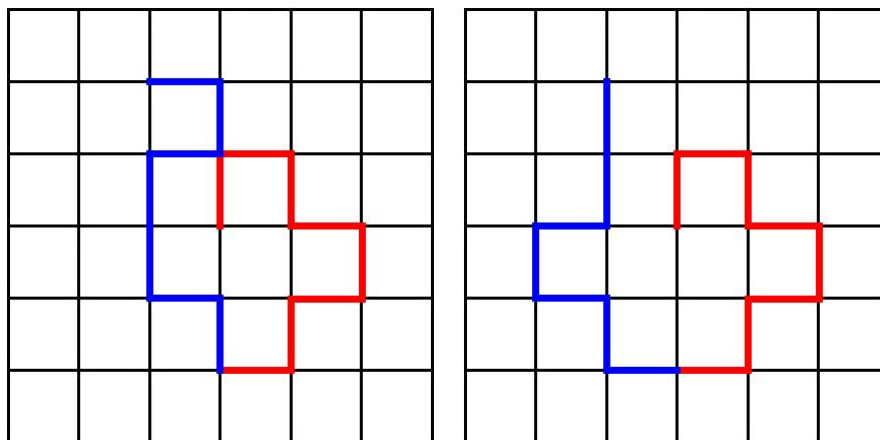
1. Het rooster is homogeen (i.h.b. is  $c_n$  onafhankelijk van het beginpunt).
2. Voor elke  $n \in \mathbb{N}$  bestaat er minstens een  $n$  stappen zelfmijdende wandeling, dit wil zeggen dat  $c_n \geq 1$ ;
3. Het aantal bindingen vanuit een punt, oftewel het coördinaatgetal is eindig;

Dan bestaat

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log c_n = \log \mu, \quad (2.1.6)$$

waar  $1 \leq \mu < \infty$ . Bovendien geldt voor elke waarde van  $n$  dat

$$\frac{1}{n} \log c_n > \log \mu. \quad (2.1.7)$$



Figuur 2.4: Een 8+7-staps niet-zelfmijdende wandeling en een 8+7-staps zelfmijdende wandeling.

*Bewijs.* Een zelfmijdende wandeling van  $n + m$  stappen kan worden opgedeeld in een zelfmijdende wandeling van  $m$  stappen gevolgd door een zelfmijdende wandeling van  $n$  stappen. De volgende ongelijkheid geldt derhalve

$$c_{m+n} \leq c_m c_n \quad \text{voor alle } m, n \in \mathbb{N}.$$

Dit kan als volgt worden ingezien. Bekijk het aantal wandelingen van  $m$  stappen,  $c_m$ . Vanuit elk eindpunt van deze  $c_m$  wandelingen worden alle mogelijke wandelingen van  $n$  stappen gedaan, dit zijn er  $c_n$ . Het totaal aantal wandelingen dat op deze manier geconstrueerd wordt is gelijk aan  $c_m c_n$ . Deze wandelingen hoeven niet allemaal zelfmijdend te zijn: vandaar dat het aantal wandelingen van  $m + n$  stappen kleiner dan of gelijk aan het aantal wandelingen van  $m$  stappen maal het aantal wandelingen van  $n$  stappen is. Het gelijkteken in  $c_{m+n} \leq c_m c_n$  geldt alleen als  $m$  en/of  $n$  gelijk aan nul is.

Omdat  $c_n \geq 1$  kan de logaritme van bovenstaande ongelijkheid genomen worden:

$$\log c_{m+n} \leq \log c_m c_n = \log c_m + \log c_n.$$

Neem nu

$$a_n = \log c_n,$$

dan geldt volgens het subadditieve rijen lemma dat  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log c_n = \log \mu$  en dat  $\frac{1}{n} \log c_n \geq \log \mu$ . Omdat alleen geldt dat  $c_{m+n} = c_m c_n$  als  $m$  en/of  $n$  gelijk aan nul is, kan er ook gesteld worden dat  $\frac{1}{n} \log c_n > \log \mu$ . ■

De uitdrukking  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log c_n = \log \mu$  is equivalent met  $c_n \sim \exp(o(n)) \mu^n$ . Noteer dit als volgt:

$$c_n = \exp(o(n)) \mu^n. \quad (2.1.8)$$

Neem de logaritme aan beide kanten:

$$\log c_n = \log [\exp(o(n)) \mu^n].$$

Dit is als volgt te schrijven:

$$\begin{aligned} \log c_n &= \log \exp(o(n)) + n \log \mu, \\ \frac{\log c_n}{n} &= \frac{o(n)}{n} + \log \mu. \end{aligned}$$

Neem nu de limiet voor  $n$  naar oneindig:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log c_n}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{o(n)}{n} + \log \mu.$$

Nu staat hier inderdaad

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log c_n}{n} = \log \mu. \quad (2.1.9)$$

Vandaar dus dat hiermee door Hammersley en Morton een bewijs geleverd is voor het bestaan van de connectiviteitsconstante  $\mu$ .

## 2.2 Grenzen voor de connectiviteitsconstante

Het bestaan van de connectiviteitsconstante  $\mu$  is nu bewezen. Welke waarde  $\mu$  aanneemt in de verschillende dimensies is het volgende probleem. Ook hier is geen exact antwoord op te geven. Er zijn wel onder- en bovengrenzen bepaald voor  $\mu$ .

### 2.2.1 Eenvoudige grenzen

De meest eenvoudige grenzen voor  $\mu$  in  $\mathbb{Z}^d$  kunnen als volgt bepaald worden:

- Een ondergrens voor  $\mu$  wordt bepaald door alleen te kijken naar het aantal wandelingen waarbij slechts in de positieve richtingen van het rooster gelopen mag worden. In  $\mathbb{Z}^2$  betekent dit dat de wandelingen alleen naar het noorden en westen mogen gaan. De wandeling, die op deze manier ontstaat, is zelfmijdend, want er kan niet omgekeerd worden en er kunnen ook geen rondjes gelopen worden. Maar er zijn flink wat meer zelfmijdende wandelingen dan deze positief gerichte, vandaar dat dit slechts een ondergrens geeft. Er zijn in totaal  $d^n$  van dit soort wandelingen.

- Een bovengrens voor  $\mu$  wordt bepaald door te kijken naar het aantal wandelingen van  $n$  stappen waarbij de enige restrictie is dat de wandeling niet om mag keren. De wandeling mag dus nooit in stap  $i$  en stap  $i + 2$  in hetzelfde punt komen. Hiermee wordt een bovengrens gecreeërd, omdat de wandelingen die na meer dan 2 stappen weer op hetzelfde punt komen niet uitgesloten worden. Dus er zijn in totaal minder zelfmijdende wandelingen. Het aantal wandelingen zonder directe omkeringen is  $2d(2d - 1)^{n-1}$ : als de wandeling begint dan kan hij elk richting op gaan en is er keuze uit  $2d$  richtingen. Na de eerste stap mag niet meer omgekeerd worden, dus de laatste  $n - 1$  stappen is er keuze uit  $2d - 1$  richtingen. Dit geeft in totaal  $2d(2d - 1)^{n-1}$  mogelijke wandelingen.

Er zijn nu dus grenzen bepaald voor het aantal wandelingen van  $n$  stappen,  $c_n$ . Om grenzen voor  $\mu$  te bepalen, wordt eerst  $\mu$  uitgedrukt in  $c_n$ . Neem de e-macht van (2.1.9). Dit geeft

$$\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} c_n^{\frac{1}{n}}. \quad (2.2.1)$$

De grenzen voor het aantal wandelingen  $c_n$  van  $n$  stappen worden gegeven door

$$d_n \leq c_n \leq 2d(2d - 1)^{n-1}. \quad (2.2.2)$$

Samen met de gevonden uitdrukking (2.2.1) voor  $\mu$  geeft dit

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} (d^n)^{\frac{1}{n}} &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} c_n^{\frac{1}{n}} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \left(2d(2d - 1)^{n-1}\right)^{\frac{1}{n}}, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} d &\leq \mu \leq \lim_{n \rightarrow \infty} 2d^{\frac{1}{n}}(2d - 1)^{1 - \frac{1}{n}}. \end{aligned}$$

Het resultaat is

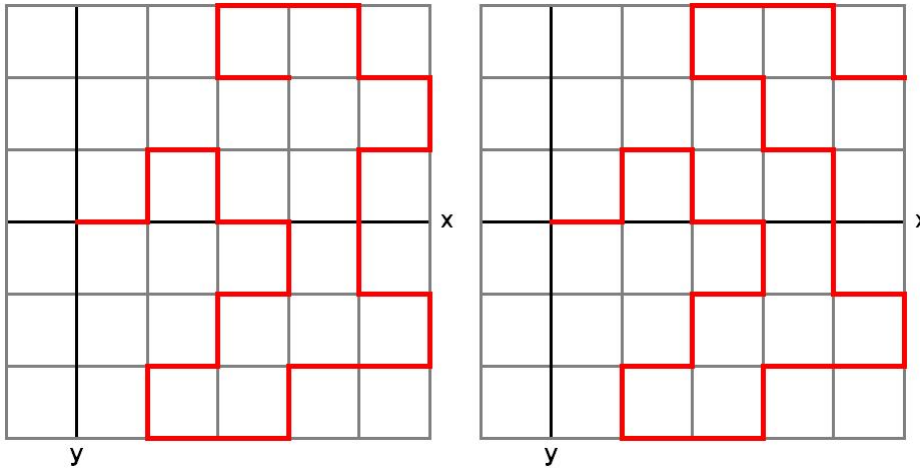
$$d \leq \mu \leq 2d - 1. \quad (2.2.3)$$

Hiermee zijn op een eenvoudige manier een onder- en bovengrens bepaald voor  $\mu$ .

## 2.2.2 Ondergrenzen

Er zijn veel betere grenzen bepaald voor  $\mu$  dan (2.2.3). Conway en Guttmann [3] hebben een ondergrens gevonden voor  $\mu$  die in dimensie 2 zeer goed is. Zij hebben deze grens gevonden met behulp van de irreducibele brug methode. Deze methode kan worden toegeschreven aan Kesten. Om deze methode te beschrijven moeten deelverzameling van de verzameling van zelfmijdende wandelingen gedefinieerd worden. Deze wandelingen worden bekeken op  $\mathbb{Z}^2$ , maar de methode werkt voor alle soorten roosters in alle dimensies.





Figuur 2.5: Links: 27-staps TAW. Rechts: 27-staps brug

### Irreducibele brug methode

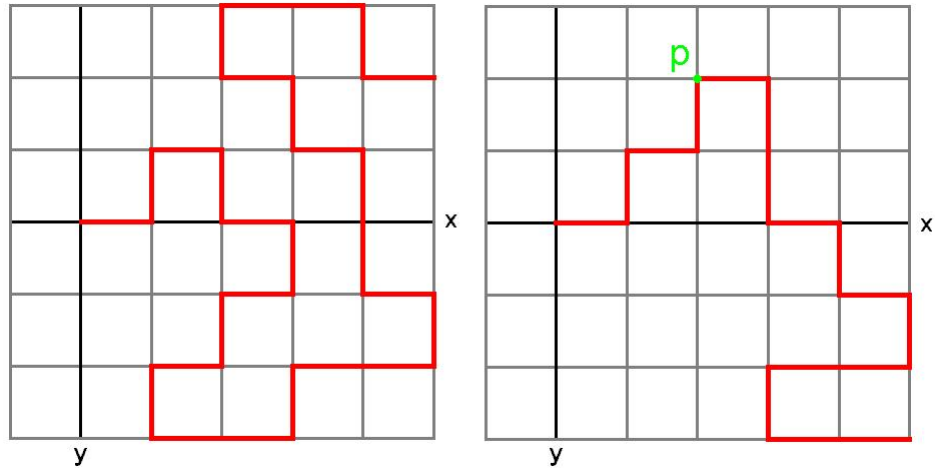
Beschouw een Cartesisch coördinatenstelsel met als oorsprong het begin van de wandeling en de assen parallel aan de assen van het rooster. De verzameling *terminally attached walks* (TAW's) bestaat uit alle zelfmijdende wandelingen waarvan de eerste stap langs de positieve  $x$ -as loopt, en waarvan de  $x$ -coördinaat van de overige punten van de wandeling nooit kleiner dan 1 is. Dit betekent dat de zelfmijdende wandeling geheel aan de rechter kant van de  $y$ -as ligt. De linker afbeelding in figuur 2.5 geeft een voorbeeld van een TAW. Het aantal TAW's van  $n$  stappen wordt aangegeven met  $t_n$  en er geldt dus dat  $t_n < c_n$  voor  $n > 0$ . Vanuit deze verzameling van TAW's kan de volgende verzameling zelfmijdende wandelingen gedefinieerd worden, genaamd bruggen. Stel dat  $x_{max}$  de maximale  $x$ -coördinaat is van een  $n$ -staps TAW. Als de  $x$ -coördinaat van het eindpunt van de wandeling gelijk is aan deze  $x_{max}$ , dan is de TAW een brug. De rechter afbeelding in figuur 2.5 geeft een voorbeeld van een brug. Het aantal  $n$ -staps bruggen wordt  $b_n$  genoemd, waarbij  $b_0 = 1$ . Er geldt dat  $b_n \leq t_n$  voor  $n \in \mathbb{N}$ . De formele definitie van een brug wordt gegeven door

**Definitie 2.2.1** Een  $n$ -staps brug in  $\mathbb{Z}^d$  is een  $n$ -staps zelfmijdende wandeling  $\omega$  (deze is gedefinieerd als in Definitie 1.1 met de aanvulling dat  $\omega(i) = (\omega_1(i), \dots, \omega_d(i))$ ) voldoet aan  $\omega(1) = 0$ ,  $\omega(1) = (1, 0, \dots, 0)$  en  $1 \leq \omega_1(i) \leq \omega_1(n)$  voor alle  $i = 1, \dots, n$ .

Door twee bruggen samen te voegen ontstaat er weer een nieuwe brug. Daarom geldt

$$b_m b_n \leq b_{m+n} \text{ voor alle } m, n \in \mathbb{N}.$$

Naast het subadditiviteitslemma bestaat ook het superadditiviteitslemma:



Figuur 2.6: Links: irreducibele brug. Rechts: niet-irreducibele brug, in punt  $p$  kan de brug gesplitst worden in 2 kortere bruggen

Stel dat  $(a_n)$ , met  $n \in \mathbb{N}$  een rij niet-negatieve getallen is die voldoet aan de superadditieve ongelijkheid:

$$a_{m+n} \geq a_m + a_n \quad \text{voor alle } m, n \in \mathbb{N}. \quad (2.2.4)$$

Dan bestaat  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n}$  en is gelijk aan  $\sup_{n \in \mathbb{N}} \frac{a_n}{n}$ .

Als  $\frac{a_n}{n}$  naar boven begrensd is, dus de  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n}$  is eindig. In het geval van de bruggen is dit zeker zo. Dan heeft dit lemma hetzelfde bewijs als dat van het subadditiviteitslemma, en wordt derhalve niet gegeven. Vanwege dit lemma geldt

$$\mu_{brug} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} = \sup_{n \in \mathbb{N}} \frac{a_n}{n}.$$

Omdat  $b_n \leq c_n$ , geldt dat  $\mu_{brug} \leq \mu$ . Er blijkt zelfs te gelden dat  $\mu_{brug} = \mu$ . Het bewijs hiervan is te vinden in [15].

Een irreducibele brug is een brug die niet opgedeeld kan worden in twee kortere bruggen. In figuur 2.6 is het linker plaatje een irreducibele brug. De brug kan in geen enkel punt in tweeën gedeeld worden, zodat er twee nieuwe bruggen ontstaan. Het rechter plaatje is geen irreducibele brug. Als in punt  $p$  de brug in tweeën gedeeld wordt, ontstaan twee nieuwe bruggen. Het aantal irreducibele bruggen wordt aangegeven door  $i_n$ . Er geldt dat  $i_n \leq b_n$  voor  $n \in \mathbb{N}$  en ook de connectiviteitsconstante van de irreducibele brug is gelijk aan de connectiviteitsconstante  $\mu$  van de zelfmijdende wandeling [15]. De genererende functies van de brug en van de irreducibele brug worden gegeven door

$$B(x) = \sum_{n \geq 0} b_n x^n,$$

$$I(x) = \sum_{n \geq 1} i_n x^n,$$

met  $x \in [0, \infty]$ . Kesten [11] heeft het volgende belangrijke lemma bewezen

$$b_n = \sum_{k=1}^n i_k b_{n-k}, \quad \text{voor alle } n \in \mathbb{N}. \quad (2.2.5)$$

Uit dit lemma volgt dat

$$B(x) = \frac{1}{1 - I(x)} \quad \text{voor } z \leq \mu^{-1}, \quad (2.2.6)$$

met

$$I(\mu^{-1}) = \sum_{n=1}^{\infty} i_n \mu^{-n} = 1.$$

Stel dat  $l_n$  een rij niet negatieve ondergrenzen is voor  $i_n$ . Er geldt dus  $0 \leq l_n \leq i_n$  voor alle  $n \in \mathbb{N}$ . Definieer

$$L(z) = \sum_{n=1}^{\infty} l_n x^n.$$

Nu zijn  $L(x)$  en  $I(x)$  beide stijgende functies en  $L(x) \leq I(x)$ . Het is mogelijk de waarden van  $L(x)$  te bepalen [17] en omdat de wortel  $x^*$  van  $L(x^*) = 1$  dus voldoet aan  $x^* \geq \mu^{-1}$  is er een ondergrens voor  $\mu$ :

$$\mu \geq \frac{1}{x^*}.$$

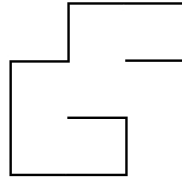
Via deze  $L(x)$  is er dus een grens te bepalen voor de connectiviteitsconstante van de irreducibele brug en via (2.2.6) ook voor de bruggen. Deze connectiviteitsconstante is gelijk aan de connectiviteitsconstante van de zelfmijdende wandeling, vandaar dat hiermee een ondergrens voor  $\mu$  bepaald is.

### 2.2.3 Bovengrenzen

De beste bovengrens die voor  $\mu$  bekend is heeft Alm [17] bepaald. Voordat de methode die Alm gebruikt uitgelegd wordt, moet een aantal notaties ingevoerd worden. Beschouw  $r < s$  met  $r, s \in \mathbb{N}_{>0}$  en een rij  $\gamma^1, \dots, \gamma^{c_r}$  van zelfmijdende wandelingen van  $r$  stappen. Stel nu dat  $g_{i,j}(r, s)$  het aantal  $s$ -staps wandelingen is waarvan de eerste  $r$  stappen gegeven worden door  $\gamma^i$  en de laatste  $r$  door  $\gamma^j$ . De matrix  $G(r, s)$  is gedefinieerd als de  $c_r \times c_r$  matrix waarvan de elementen bestaan uit  $g_{i,j}(r, s)$ :

$$G(r, s) = \begin{matrix} & \gamma^1 & \gamma^2 & \dots & \gamma^{c_r} \\ \gamma^1 & \left( \begin{array}{cccc} g_{1,1}(r, s) & g_{1,2}(r, s) & \dots & g_{1,c_r}(r, s) \\ g_{2,1}(r, s) & g_{2,2}(r, s) & \dots & g_{1,1}(2, c_r) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \gamma^{c_r} & g_{c_r,1}(r, s) & g_{c_r,2}(r, s) & \dots & g_{c_r,c_r}(r, s) \end{array} \right) \end{matrix}$$

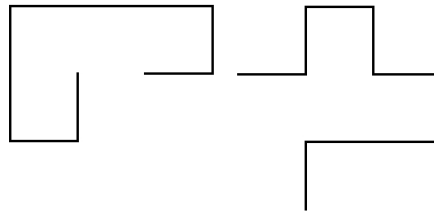
Omdat er altijd de mogelijkheid is dat een  $r$ -staps wandeling  $\gamma^i$  zichzelf opsluit (zie figuur 2.7), kunnen er nullen in de matrix staan. Deze  $r$ -staps zelfmijdende



Figuur 2.7: Een zelfmijdende wandeling op  $\mathbb{Z}^2$  die zichzelf opsluit.

wandelingen kunnen nooit samen met een andere  $r$ -staps zelfmijdende wandeling een nieuwe zelfmijdende wandeling vormen. Er kunnen ook nullen in de matrix ontstaan als de  $r$ -staps zelfmijdende wandelingen zichzelf niet opsluiten. Figuur 2.8 geeft twee ( $r = 7$ )-staps zelfmijdende wandelingen, die nooit samen een ( $s = 15$ )-staps zelfmijdende wandeling kunnen vormen.

Om deze problemen te voorkomen wordt  $s$  heel groot genomen in vergelijking tot  $r$  en worden  $r$ -staps zelfmijdende wandelingen die zichzelf opsluiten niet toegestaan. Noem de nieuwe matrix die nu ontstaat weer  $G(r, s)$  (deze kan kleiner zijn dan de oorspronkelijke matrix  $G(r, s)$ ). Omdat er geen nullen meer in de matrix  $G(r, s)$  staan is deze matrix irreducibel. Volgens de stelling van Perron-Frobenius is de grootste eigenwaarde van  $G(r, s)$  simpel en strict positief. Noem deze eigenwaarde  $\lambda_1(r, s)$ . Nu geldt de volgende ongelijkheid:



Figuur 2.8: De linker en rechter wandeling kunnen samen nooit een zelfmijdende wandeling vormen.

$$\mu \leq [\lambda_1(r, s)]^{\frac{1}{s-r}}, \quad (2.2.7)$$

die een bovengrens voor  $\mu$  geeft.

*Bewijs.* (2.2.7)

Beschouw twee  $s$ -staps zelfmijdende wandelingen, waarvan één begint met  $\gamma^{(i)}$  en eindigt met  $\gamma^{(k)}$  en de ander begint met  $\gamma^{(k)}$  en eindigt met  $\gamma^{(j)}$ . De wandelingen kunnen samengevoegd worden, zodanig dat het gedeelte  $\gamma^{(k)}$  overlapt. Er zijn dus precies  $r$  stappen die overlappen, waardoor de samengevoegde wandeling een  $(r + 2(s - r))$ -staps wandeling is. Als  $\alpha^1$  en  $\alpha^2$  de stukken in de twee wandelingen aangeven die tussen de  $r$ -staps wandelingen liggen dan kan dit als volgt ingezien worden:

$$\underbrace{\gamma^i}_r \quad \underbrace{\alpha^1 \gamma^k}_{s-r} \quad \underbrace{\alpha^2 \gamma^j}_{s-r}.$$

Het is mogelijk om op deze manier alle zelfmijdende wandelingen van  $(r + 2(s - r))$  stappen te vormen. Daarom geldt

$$g_{i,j}(r, r + 2(s - r)) \leq \sum_k g_{i,k}(r, s) g_{k,j}(r, s) = [G^2(r, s)]_{i,j}.$$

Op dezelfde manier is het mogelijk om drie  $s$ -staps zelfmijdende wandelingen samen te voegen tot één:

$$\underbrace{\gamma^i}_r \quad \underbrace{\alpha^1 \gamma^k}_{s-r} \quad \underbrace{\alpha^2 \gamma^l}_{s-r} \quad \underbrace{\alpha^3 \gamma^j}_{s-r}.$$

En nu is het resultaat een  $(r + 3(s - r))$ -staps zelfmijdende wandeling. En ook alle  $(r + 3(s - r))$ -staps wandelingen kunnen op deze manier gevormd worden, dus zal

$$g_{i,j}(r, r + 3(s - r)) \leq \sum_k g_{i,k}(r, s) g_{k,l}(r, s) g_{l,j}(r, s) = [G^3(r, s)]_{i,j}.$$

Als bovenstaand argument herhaald wordt, dan geldt in het algemeen dat

$$g_{i,j}(r, r + m(s - r)) \leq [G^m(r, s)]_{i,j}. \quad (2.2.8)$$

De norm van een positieve matrix  $A$  met elementen  $(a_{i,j})$  wordt gegeven door  $\|A\| = \sum_{i,j} a_{i,j}$ . Daarom is  $\|G(r, s)\| = \sum_{i,j} g_{i,j}(r, s) = c_s$ . Vanwege (2.2.8) geldt dat

$$c_{r+m(s-r)} = \|G(r, r + m(s - r))\| \leq \|G^m(r, s)\|.$$

Vanwege (2.2.1) geldt nu

$$\begin{aligned} \mu &= \lim_{m \rightarrow \infty} \|G(r, r + m(s - r))\|^{\frac{1}{r+m(s-r)}}, \\ &\leq \lim_{m \rightarrow \infty} \|G^m(r, s)\|^{\frac{1}{r+m(s-r)}}. \end{aligned}$$

Omdat voor een positieve irreducibele matrix geldt dat  $\|A^m\|^{\frac{1}{m}} \rightarrow \lambda_1$  als  $m \rightarrow \infty$ , voor  $\lambda_1$  de grootste eigenwaarde van  $A$ , geldt dat

$$\mu \leq \|G^m(s, r)\|^{\frac{1}{r+m(s-r)}} = [\lambda_1(r, s)]^{\frac{1}{s-r}}$$

■

De bovengrens  $[\lambda_1(r, s)]^{\frac{1}{s-r}}$  is numeriek bepaald. Hoe groter de waarden van  $s$  en  $r$  zijn hoe beter de grens voor  $\mu$  is. Omdat de matrix  $G(s, r)$  exponentieel groeit als  $r$  groter wordt, is het in de praktijk niet goed mogelijk om de waarden van  $s$  en  $r$  heel groot te nemen. Door middel van symmetrie kan de matrix  $G$  kleiner gemaakt worden. Dit is gebeurd om de bovengrens in  $d = 2$  te bepalen. Hier zijn de waarden  $s = 24$  en  $r = 8$  genomen, waardoor de  $C_8 \times C_8$ -matrix van een  $5916 \times 5916$  matrix tot een  $740 \times 740$  is gereduceerd. Met uiteindelijk als resultaat de grens  $\mu \leq 2.69576$ .

## Hoofdstuk 3

# De spreiding van de stochastische zelfmijdende wandeling

De tweede belangrijke vraag over zelfmijdende wandelingen is: hoe ver bevindt de wandeling zich van de oorsprong na  $n$  stappen. Dit hoofdstuk gaat op deze vraag in en op al het onderzoek dat op dit gebied is gedaan.

### 3.1 De gemiddelde kwadratische afstand

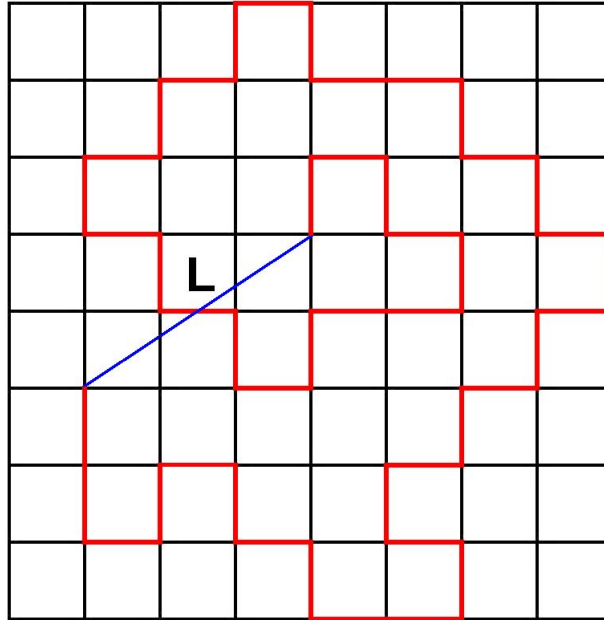
Beschouw een zelfmijdende wandeling  $(\omega(1) \dots \omega(n))$  van  $n$  stappen op een homogeen rooster. Het maakt niet uit of de wandeling in de oorsprong begint of niet, aangezien het rooster homogeen is. Laat de wandeling dus in de oorsprong beginnen. Bekijk de gemiddelde afstand van de oorsprong tot het eindpunt van de wandeling in het kwadraat. Deze gemiddelde kwadratische afstand wordt gegeven door

$$\langle |\omega(n)|^2 \rangle = \frac{1}{c_n} \sum_{\omega: |\omega|=n} |\omega(n)|^2, \quad (3.1.1)$$

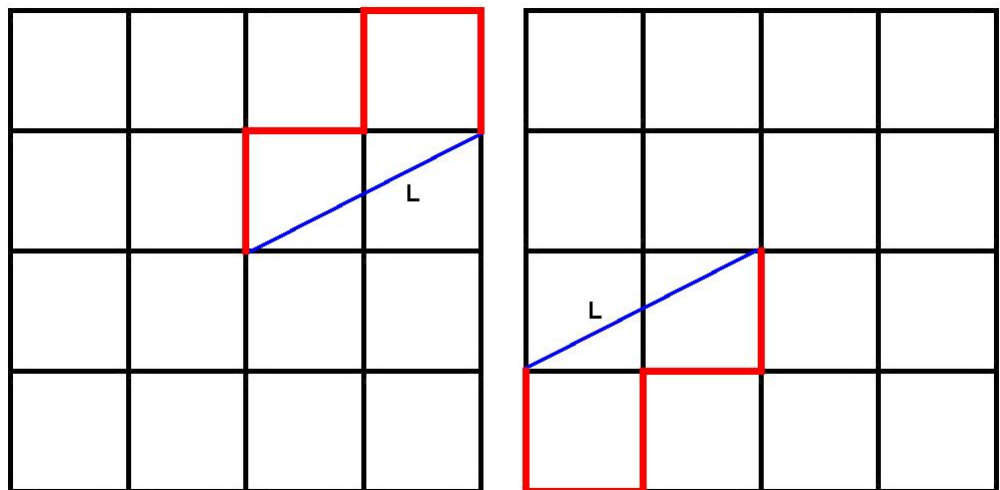
waar  $|\omega|$  de lengte van de wandeling aangeeft. Figuur 3.1 laat zien wat precies de lengte  $L = |\omega(n)|$  van één wandeling is.

De gemiddelde lengte van alle wandelingen is gelijk aan 0. Figuur 3.2 geeft twee wandelingen die elkaars tegengestelde zijn. De lengte van rechter wandeling is de lengte van de linker wandeling, maar dan met een minteken ervoor. En zo heeft elke zelfmijdende wandeling één andere zelfmijdende wandeling die de lengte precies zal opheffen.

De gemiddelde kwadratische afstand voor een vrije wandeling  $\langle |\omega(n)|^2 \rangle$  is gelijk aan  $n$ . Dit kan als volgt aangetoond worden. Stel  $S_n$  is het eindpunt van de



Figuur 3.1: De lengte  $L = |\omega(n)|$  van de zelfmijdende wandeling



Figuur 3.2: De inker wandeling heeft precies dezelfde lengte als de rechter wandeling, maar dan tegengesteld.



wandeling na  $n$  stappen. Dan kan  $S_n$  geschreven worden als de som van  $n$  onafhankelijke stochastische variabelen:

$$S_n = X^{(1)} + X^{(2)} + \dots + X^{(n)}$$

De gemiddelde kwadratische afstand wordt gegeven door

$$\langle |S_n|^2 \rangle = \sum_{i,j=1}^n \langle X^{(i)} X^{(j)} \rangle.$$

De termen  $X^{(i)}$  en  $X^{(j)}$  zijn onafhankelijk als  $i \neq j$ , dus er geldt dat

$$\langle X^{(i)} X^{(j)} \rangle = \langle X^{(i)} \rangle \langle X^{(j)} \rangle \quad \text{voor alle } i \neq j.$$

Omdat  $\langle X^{(i)} \rangle = 0$  is dus  $\langle X^{(i)} X^{(j)} \rangle = 0$  als  $i \neq j$ . Als  $i = j$  dan geldt dat  $\langle X^{(i)} X^{(j)} \rangle = 1$ . Dus de totale som wordt

$$\langle |S_n|^2 \rangle = \sum_{i=1}^n \langle X^{(i)} X^{(i)} \rangle = n. \quad (3.1.2)$$

Voor de zelfmijdende wandeling zal de gemiddelde kwadratische afstand intuïtief gezien groter dan  $n$  zijn. Immers door de beperking dat de wandeling zichzelf niet mag doorsnijden wordt het eindpunt van de wandeling verder weggedreven van de oorsprong. Dit is overigens niet bewezen. Naast de ondergrens  $n$  is er ook een bovengrens voor de gemiddelde kwadratische afstand van de zelfmijdende wandeling. Deze wordt gegeven door

$$\langle |\omega(n)|^2 \rangle \leq n^2.$$

De grootste afstand die de  $n$ -staps wandeling zich van de oorsprong kan bevinden is precies  $n$ . Dus dan is de kwadratische afstand gelijk aan  $n^2$ . De gemiddelde kwadratische afstand voor zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen ligt dus tussen  $n$  en  $n^2$ . Er blijkt dat deze afstand wordt gegeven door

$$\langle |S_n|^2 \rangle = Dn^{2\nu}, \quad (3.1.3)$$

waarbij  $\nu$  de kritieke exponent genoemd wordt. Door middel van numerieke methoden en wiskundige bewijzen zijn waarden gevonden voor  $\nu$ . In het volgende hoofdstuk wordt een benadering gegeven voor deze kritieke exponent die Flory en Fisher [5] bepaald hebben.

## 3.2 Fisher-Flory argument

Het Fisher-Flory argument geeft de volgende formule voor de exponent  $\nu$

$$\nu = \begin{cases} \frac{3}{d+2} & \text{voor } d \leq 4 \\ \frac{1}{2} & \text{voor } d \geq 5 \end{cases}. \quad (3.2.1)$$

waarbij  $d$  de dimensie is. Deze waarde van exponent wordt gevonden door middel van een methode die wiskundig gezien niet exact en consistent is. Toch geeft deze methode de correcte waarde van  $\nu$  voor  $d = 1$  en  $d \geq 5$  en zeer waarschijnlijk ook voor  $d = 2$  en  $d = 4$ . Maar voor deze laatste twee is dit nog niet bewezen. Voor  $d = 3$  suggereren numerieke methoden dat de Fisher-Flory formule niet klopt. Er is een waarde bepaald voor  $\nu$  die kleiner is dan  $\frac{3}{5}$ , namelijk 0.588. Maar dit verschil is zo klein (2%), dat ook hier de Fisher-Flory formule een uitstekende waarde geeft. Voor  $d \geq 5$  geldt niet dat  $\nu$  gelijk is aan  $\frac{3}{d+2}$ , dit wordt later duidelijk. Nu volgt de methode waarmee Fisher en Flory (3.2.1) bepaald hebben.

Beschouw de ruimte van alle  $n$  stappen paden:

$$\Omega_n = \{(\omega_i)_{i=1}^n : \omega_0 = 0, |\omega_i - \omega_{i-1}| = 1 \text{ voor alle } 0 \leq i \leq n\}. \quad (3.2.2)$$

En beschouw een functie  $\omega \mapsto H_n(\omega)$  op  $\Omega_n$ . Deze functie heet de Hamiltoniaan en wordt gegeven door

$$H_n(\omega) = \sum_{0 \leq i < j \leq n} 1_{\{\omega_i = \omega_j\}}, \quad (3.2.3)$$

dit wil zeggen dat  $H_n(\omega)$  het aantal doorsnijdingen van een pad met zichzelf telt. Als het pad zichzelf één keer doorsnijdt, dan is  $H_n(\omega)$  gelijk aan 1. Doorsnijdt het pad zichzelf twee keer, dan is  $H_n(\omega)$  gelijk aan 2, enzovoort. De Hamiltoniaan is nodig om de volgende kansmaat op de ruimte  $\Omega_n$  te definiëren:

$$P_n^\beta(\omega) = \frac{1}{Z_n^\beta} \exp[-\beta H_n(\omega)] \quad \forall \omega \in \Omega_n. \quad (3.2.4)$$

Hier is  $P_n^\beta(\omega)$  de kans dat een wandeling  $\omega$  optreedt. Om precies te zijn geeft deze kansmaat een kansverdeling van de zwakke zelfmijdende wandelingen weer. Voordat precies uitgelegd wordt wat  $P_n^\beta(\omega)$  is, wordt deze kansmaat herschreven, zodat hij een verstoring van de vrije wandeling weergeeft.

$$P_n^\beta(\omega) = \frac{1}{Z_n^\beta} \exp[-\beta H_n(\omega)] P_n^0(\omega) \quad \forall \omega \in \Omega_n.$$

Hierin is  $P_n^0(\omega)$  de uniforme verdeling van  $\Omega_n$  voor de vrije wandeling die start in 0. Deze kans wordt gegeven door

$$P_n^0(\omega) = (2d)^{-n} \quad \forall \omega \in \Omega_n. \quad (3.2.5)$$

Om te zorgen dat  $P_n^\beta(\omega)$  precies dezelfde kans blijft geven, is een nieuwe normaliseringsconstante  $Z_n^\beta = Z_n^0 (2d)^{-n}$  nodig. De constante  $\beta$  geeft een straf op

zelfdoorsnijdingen. Als  $\beta$  gelijk aan 0 is, dan worden alle zelfdoorsnijdingen toegestaan en geeft  $P_n^\beta(\omega)$  de kans op een vrije wandeling. Als  $\beta = \infty$ , dan worden zelfdoorsnijdingen niet toegelaten en geeft  $P_n^\beta(\omega)$  de kans op een zelfmijdende wandeling.

De constante  $\hat{Z}_n^\beta$  is, zoals reeds verteld, de normaliseringsconstante. Als  $\beta = 0$ , dan is  $\hat{Z}_n^\beta$  gelijk aan 1. Dit kan ingezien worden door  $\beta = 0$  in te vullen in  $P_n^\beta(\omega)$ :

$$P_n^0(\omega) = \frac{1}{\hat{Z}_n^0} P_n^0(\omega) \quad \forall \omega \in \Omega_n.$$

Deze gelijkheid is alleen correct als de normaliseringsconstante  $\hat{Z}_n^\beta$  gelijk aan 1 is. Als  $\beta = \infty$  dan is de normaliseringsconstante gelijk aan  $c_n (2d)^{-n}$ . Immers vul  $\beta = \infty$  in, in de vergelijking. Als het pad zichzelf één of meerdere keren doorsnijdt, dan is  $H_n(\omega) > 0$  en omdat  $\exp(-\beta)$  met  $\beta = \infty$  gelijk aan 0 is, is  $P_n^\infty(\omega)$  gelijk aan 0. Dus alleen paden die zichzelf niet doorsnijden hebben een positieve kans. De Hamiltoniaan is in dit geval gelijk aan 0, waardoor  $\exp(0) = 1$ . De kans op een zelfmijdende wandeling wordt gegeven door

$$P_n^\infty(\omega) = \frac{1}{\hat{Z}_n^\infty} P_n^0(\omega) \quad \forall \omega \in \Omega_n.$$

Deze vergelijking geeft de kans op een zelfmijdende wandeling als  $\hat{Z}_n^\beta$  gelijk aan  $c_n (2d)^{-n}$  is. De kans op een zelfmijdende wandeling van  $n$  stappen, wordt dan uitgedrukt in  $c_n$ . Aangezien  $c_n$  niet voor alle  $n$  bekend is, kan niet verder gerekend worden met deze kans. Numerieke berekeningen laten zien dat  $0 < \beta < \infty$  kwalitatief gelijke resultaten geeft als  $\beta = \infty$ . En hier kan wel verder mee gewerkt worden.

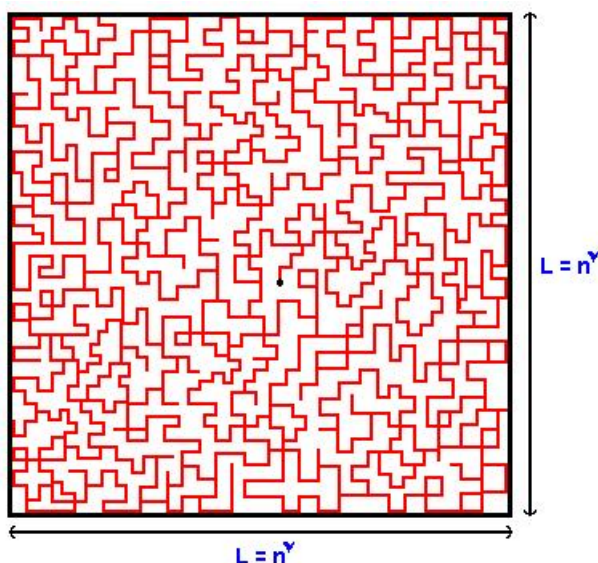
Allereerst wordt  $H_n(\omega)$  herschreven, zodat er beter mee gerekend kan worden.

$$H_n(\omega) = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i,j=0}^n 1_{\{\omega_i=\omega_j\}} - (n+1) \right]$$

De factor  $\frac{1}{2}$  komt ervoor te staan omdat in de nieuwe sommatie niet alleen  $\omega_i = \omega_j$  meetelt maar ook  $\omega_j = \omega_i$ . Er wordt  $n+1$  afgehaald omdat bij deze sommatie ook alle termen  $\omega_i = \omega_j$  met  $i = j$  worden meegeteld en dit zijn er  $n+1$ . Deze laatste formule kan vervolgens herschreven worden tot

$$\begin{aligned} H_n(\omega) &= \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} 1_{\{\omega_i=\omega_j=x\}} - (n+1) \right], \\ &= \frac{1}{2} \left[ \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \left( \sum_{i=0}^n 1_{\{\omega_i=x\}} \right)^2 - (n+1) \right]. \end{aligned}$$

Nu wordt duidelijk waarom de Hamiltoniaan herschreven is, omdat  $\sum_{i=0}^n 1_{\{\omega_i=x\}}$  aangeeft hoe vaak je in een punt  $x$  geweest bent op tijdstip  $n$ . En hier kan

Figuur 3.3: Wandeling in  $L$ -doos uniform verdeeld.

gemakkelijk mee gerekend worden, dit zal later duidelijk worden. Om de notatie eenvoudig te houden wordt  $l_{n,x}(\omega) = \sum_{i=0}^n 1_{\{\omega_i=x\}}$ . De nieuwe Hamiltoniaan wordt ingevuld in de oorspronkelijke kansmaat voor  $\omega \in \Omega_n$ :

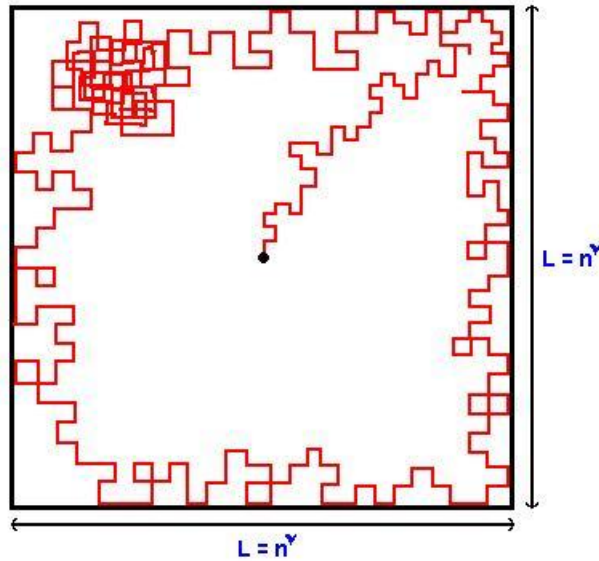
$$P_n^\beta(\omega) = \frac{1}{\hat{Z}_n^\beta} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \left(\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega)^2 - (n+1)\right)\right) P_n^0(\omega).$$

Vervolgens wordt de term  $\exp(-n-1)$  bij de normalisatieconstante genomen. Er ontstaat een nieuwe normalisatieconstante  $\tilde{Z}_n^\beta$ . De constante  $\beta$  wordt  $\tilde{\beta} = \frac{\beta}{2}$ , zodat de term  $\frac{1}{2}$  wegvalt. Het resultaat is

$$P_n^{\tilde{\beta}}(\omega) = \frac{1}{\tilde{Z}_n^{\tilde{\beta}}} \exp\left(-\tilde{\beta} \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega)^2\right) P_n^0(\omega). \quad (3.2.6)$$

Alle stappen die tot nu toe genomen zijn om (3.2.4) te herschrijven tot (3.2.6) zijn wiskundig correct. Vanaf nu wordt de methode meer intuïtief.

Er moet een antwoord gevonden worden op de vraag: **Wat is de kans onder de kansmaat  $P_n^{\tilde{\beta}}$  dat een  $n$ -staps pad straal  $n^\nu$  heeft?** In plaats van te kijken naar de kans dat een pad straal  $n^\nu$  heeft, wordt gekeken naar de kans dat een pad binnen een doos leeft waarvan de lengte van de zijden gelijk aan is  $L = n^\nu$ . Hierbij wordt er vanuit gegaan dat de wandeling binnen de doos blijft en ook niet in een kleinere doos leeft. Er wordt ook vanuit gegaan dat de wandeling uniform over de doos verdeeld is. Figuur 3.3 laat een uniform verdeelde wandeling over een doos met zijde  $L = n^\nu$  (in dimensie 2) zien, terwijl figuur 3.4 illustreert wat een niet uniform verdeelde wandeling zou



Figuur 3.4: Wandeling in  $L$ -doos niet-uniform verdeeld.

kunnen doen. Ondanks dat deze wandeling binnen de doos blijft en niet in een kleinere doos leeft, wordt hij toch niet meegenomen onderstaande redenering, omdat de kans op deze wandeling naar verwachting te klein is (vanwege de te grote Hamiltoniaan).

Er zijn twee onbekende termen in de kansmaat  $P_n^{\tilde{\beta}}(\omega)$  die bepaald moeten worden.

- $\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega)^2$ .

Om deze term te bepalen wordt eerst  $\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega)$  bepaald zonder de beperking dat de wandeling in de doos leeft. De term  $l_{n,x}(\omega)$  geeft aan hoe vaak je in een punt  $x$  komt. En dit wordt gesommeerd over alle punten  $x$  in de wandeling. Een wandeling van  $n$  stappen arriveert  $n + 1$  keer in een punt, zodat

$$\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega) = n + 1. \quad (3.2.7)$$

Beschouw nu de volgende formule voor  $l_{n,x}(\omega)$  in het geval dat de wandeling binnen de  $L$ -doos ligt:

$$l_{n,x}(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{als } x \notin L\text{-doos,} \\ c & \text{als } x \in L\text{-doos.} \end{cases}$$

Hier wordt buiten de  $L$ -doos geen enkel punt bezocht, dus is  $l_{n,x(\omega)}$  daar 0. Binnen de  $L$ -doos wordt elk punt  $c$  keer bezocht. Deze waarde  $c$  is voor

elk punt gelijk, aangezien de wandeling uniform over de  $L$ -doos verdeeld is. Er zijn in totaal  $(n^\nu)^d = n^{d\nu}$  punten in de doos, dus

$$\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega) = cn^{d\nu}. \quad (3.2.8)$$

Door de twee gevonden uitdrukkingen voor  $\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega)$ , (3.2.7) en (3.2.8), aan elkaar gelijk te stellen, waarbij  $n + 1$  afgerond wordt naar  $n$ , vinden we dat

$$c = \frac{n}{n^{d\nu}} = l_{n,x}(\omega).$$

Dan wordt

$$\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} l_{n,x}(\omega)^2 = (n^{d\nu}) \left( \frac{n}{n^{d\nu}} \right)^2, \quad (3.2.9)$$

waarbij het aantal punten in de  $L$ -doos weer gelijk is aan  $n^{d\nu}$ .

- $P_n^0(\omega)$ .

Deze kansverdeling beschrijft de kans dat een vrije wandeling binnen de  $L$ -doos uniform verdeeld is. De wandeling kan bekeken worden als de som van  $n$  onafhankelijke verdeelde en identiek stochastische variabelen  $X_i$ , die elk kans  $2d^{-1}$  hebben:

$$S_n = \sum_{i=1}^n X_i.$$

Deze som geeft dus aan elke stap  $x_i$  van de wandeling de waarde  $X_i$ . De centrale limiet stelling voor meerdere dimensies geeft dat, als  $n \rightarrow \infty$ ,

$$P(S_n = x) \approx \frac{1}{(2\pi n)^{\frac{d}{2}}} \exp\left(-\frac{\|x\|^2}{2n}\right).$$

Deze kans wordt als volgt herschreven:

$$P(S_n = x) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \exp\left(-\left(\frac{\|x\|^2}{2n} + \frac{d}{2} \log n\right)\right).$$

De term  $(2\pi)^{-\frac{d}{2}}$  zal in het eindresultaat niet van belang zijn, en wordt derhalve verwaarloosd. De bijdrage van de term  $\frac{d}{2} \log n$  valt in het niet bij  $\|x\|^2 (2n)^{-1}$ , zoals later zal blijken, en wordt ook verwaarloosd.

En als ook de factor  $\frac{1}{2}$  vergeten wordt in  $\|x\|^2 (2n)^{-1}$  dan blijft

$$P(S_n = x) \approx \exp\left(-\frac{\|x\|^2}{n}\right)$$

over. Om de kans te berekenen dat de vrije wandeling binnen de  $L$ -doos blijft wordt  $x = n^\nu$  ingevuld. De volgende verdeling is het resultaat:

$$P_n^0(\omega) \approx \exp\left(-\frac{(n^\nu)^2}{n}\right). \quad (3.2.10)$$

Nu kunnen (3.2.9) en (3.2.10) ingevuld worden in  $P_n^{\tilde{\beta}}(\omega)$ . Dit geeft

$$\begin{aligned} P_n^{\tilde{\beta}} &= \frac{1}{\tilde{Z}_n^{\tilde{\beta}}} \exp\left(-\tilde{\beta} n^{d\nu} \left(\frac{n}{n^{d\nu}}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{n^{2\nu}}{n}\right), \\ &= \frac{1}{\tilde{Z}_n^{\tilde{\beta}}} \exp\left(-\left(\tilde{\beta} n^{2-d\nu} + n^{2\nu-d}\right)\right). \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

Om de meest waarschijnlijk waarde van  $\nu$  te vinden moet  $P_n^{\tilde{\beta}}(\omega)$  gemaximaliseerd worden. Hierbij kan  $(\tilde{Z}_n^{\tilde{\beta}})^{-1}$  vergeten worden, aangezien deze term niet van  $\nu$  afhangt. De overgebleven term  $\exp\left(-\left(\tilde{\beta} n^{2-d\nu} + n^{2\nu-d}\right)\right)$  maximaliseren is hetzelfde als  $\tilde{\beta} n^{2-d\nu} + n^{2\nu-d}$  minimaliseren. Er is gemakkelijk in te zien dat deze vergelijking minimaal is als  $2-d\nu$  gelijk is aan  $2\nu-1$ . De kritieke exponent  $\nu$  is in dit geval gelijk aan de Fisher-Flory formule

$$\nu = \frac{3}{d+2}.$$

Nu is ook gemakkelijk in te zien dat de formule niet geldt voor  $d \geq 5$ . Als (3.2.12) ingevuld wordt in  $2-d\nu$  (of  $2\nu-1$ ), dan wordt de vergelijking gegeven door

$$2 - \frac{3d}{d+2} = \frac{4-d}{d+2}.$$

Als de dimensie  $d$  groter dan 4 wordt komt er 1 te staan en is er geen interessante competitie tussen de termen  $\sum_{x \in \mathbb{Z}} l_{n,x}(\omega)^2$  en  $P_n^0(\omega)$ . In dit geval blijkt  $\nu = \frac{1}{2}$  de relevante waarde te zijn met  $P_n^0(\omega) \approx 1$ . Een zelfmijdende wandeling in dimensie groter dan vier heeft een hele kleine kans om zichzelf tegen te komen. De wandeling gaat zich gedragen als een vrije wandeling en voor de vrije wandeling geldt  $\nu = \frac{1}{2}$ .

## Hoofdstuk 4

# Numerieke methoden

Uit de voorgaande hoofdstukken is gebleken dat het niet eenvoudig is om de connectiviteitsconstante  $\mu$  en de kritieke exponent  $\nu$  te vinden. Met behulp van de computer zijn voor  $\mu$  en  $\nu$  zeer goede benaderingen gevonden. Dit hoofdstuk zal de numerieke methoden behandelen die hiervoor gebruikt zijn.

### 4.1 Monte Carlo methoden

Monte Carlo methoden kunnen gebruikt worden om statistische schatters voor de connectiviteitsconstante en voor de kritieke exponent te bepalen. Een Monte Carlo simulatie is een computerexperiment van een specifiek systeem. Als er genoeg data verzameld is dan worden met behulp van statistische methoden schatters en betrouwbaarheidsintervallen verkregen. In dit geval worden zelfmijdende wandelingen random gegenereerd. Zodra er genoeg zelfmijdende wandelingen gegenereerd zijn, worden de schatters bepaald. Een Monte Carlo experiment [1] voor de schatter van  $\nu$  zou er als volgt uitzien:

1. Kies verschillende waarden van  $n$ :  $n_1, \dots, n_m$
2. Genereer random voor elke  $n_i$  een groot aantal  $n_i$ -staps zelfmijdende wandelingen. Gebruik deze wandelingen om een schatter  $\hat{Y}_i$  van  $\langle |\omega(n_i)| \rangle$  te vinden.
3. Vind een kromme van de vorm  $Y = An^{2B}$  door alle punten  $(n_i, \hat{Y}_i)$ . De beste waarde van  $B$  zal de schatter van  $\nu$  zijn.

In stap 2 worden random zelfmijdende wandelingen gegenereerd. Hierbij wordt met random bedoeld, dat elke wandeling  $\omega$  gelijke kans heeft om gegenereerd te worden. Er zijn verschillende methoden om dit te doen. Neem  $\Omega_n$  weet als de verzameling van alle  $n$ -staps zelfmijdende wandelingen. Het volgende algoritme creëert op een eenvoudige manier zelfmijdende wandelingen:

1. Neem  $\omega(0)$  als de oorsprong en neem  $i = 0$ .
2. Verhoog  $i$  met 1. Kies een van de  $2d$  naaste burens van  $\omega(i-1)$  willekeurig met gelijke kans en noem het punt  $\omega(i)$ .



3. Als  $\omega(i) = \omega(j)$  voor  $j = 0, 1, \dots, i-1$ , ga terug naar stap 1. Anders ga naar stap 2 zolang  $i < n$  en stop als  $i = n$ .

Dit algoritme genereert random zelfmijdende wandelingen, omdat elke wandeling  $\omega$  kans  $c_n^{-1}$  heeft. Het algoritme is echter niet zeer snel. De kans dat een  $n$ -staps vrije wandeling zelfmijdend is, is gelijk aan  $c_n (2d)^{-n}$ . Het gemiddelde aantal keren dat het algoritme terugkeert naar stap 1 is daarom gelijk aan  $(2d)^n c_n^{-1}$ . Als  $T_X$  de verwachte tijd is dat een computer nodig heeft met algoritme  $X$  om een zelfmijdende wandeling van  $n$  stappen te genereren dan wordt  $T_X$  dus gegeven door

$$T_X = \left( \frac{2d}{\mu} \right)^{n+o(n)}.$$

Het vorige algoritme kan sneller worden gemaakt door de beperking toe te voegen dat, als de wandeling in het punt  $i+1$  is, hij niet terug mag naar het punt  $i$ . Dan wordt er in stap twee niet uit alle naaste burens gekozen, maar slechts uit  $2d-1$  naaste burens. Bij dit algoritme zou de kans om terug te keren naar stap 1 gelijk aan  $\frac{2d(2d-1)^n}{c_n}$  zijn, en wordt

$$T_X = \left( \frac{2d-1}{\mu} \right)^{n+o(n)}.$$

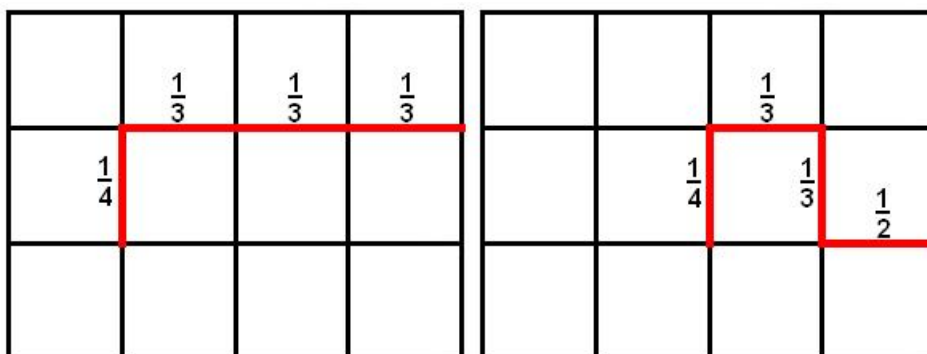
Toch genereert ook dit algoritme geen zelfmijdende wandeling in polynomiale tijd. Een voor de hand liggend algoritme, die dit wel zou doen, is het volgende:

*Bijziende zelfmijdende wandeling (MSAW).* Dit algoritme genereert een random wandeling door bij elke stap alleen te kiezen uit de punten die nog niet bezocht zijn.

1. Het punt  $\omega(0)$  is de oorsprong en  $i = 0$ .
2. Verhoog  $i$  met 1. Kies een punt uit alle burens van  $\omega(i-1)$ , die niet in verzameling  $\{\omega(0), \dots, \omega(i-2)\}$  liggen en noem dit punt  $\omega(i)$ . (Keer terug naar stap 1 als alle burens van  $\omega(i-1)$  in deze verzameling liggen.)
3. Herhaal stap 2 zolang  $i < n$  en stop als  $i = n$ .

Dit algoritme lijkt in eerste instantie goed te werken, maar helaas blijkt dit niet waar te zijn. Er blijkt dat, in tegenstelling tot de twee bovengenoemde algoritmen, dit algoritme een wandeling in  $\Omega_n$  genereert met de verkeerde verdeling. Dit kan als volgt geïllustreerd worden. Beschouw een 4-staps wandeling op  $\mathbb{Z}^2$ . De kans dat de wandeling de eerste stap naar het noorden gaat en vervolgens drie keer naar het oosten is  $\frac{1}{4} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{3}$ , terwijl de kans dat een wandeling de opeenvolgende richtingen noord, oost, zuid, oost op gaat gelijk is aan  $\frac{1}{4} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{2}$  (figuur 4.1). Niet elke wandeling heeft dus een gelijke kans om genereerd te worden. Dus de verdeling is niet uniform.

De eerste twee algoritmen kunnen niet in polynomiale tijd een zelfmijdende



Figuur 4.1: Twee 4 steps wandelingen in  $\mathbb{Z}^2$  met ongelijke kans.

wandeling genereren en het laatste algoritme genereert wandelingen met de verkeerde verdeling.

Om een zelfmijdende wandeling in polynomiale tijd te genereren moet een ander soort methode gebruikt worden. Deze methode is een zogenaamde dynamische Monte Carlo methode, in tegenstelling tot de bovenstaande methoden, die statistische Monte Carlo methoden zijn. Het verschil is dat bij statistische Monte Carlo methoden onafhankelijke wandelingen gegenereerd worden, terwijl bij dynamische methoden een rij wandelingen wordt gegenereerd. Deze rij wandelingen wordt gegenereerd door gebruik te maken van een Markovketen. De methode heet de Monte Carlo Markov Keten (MCMK).

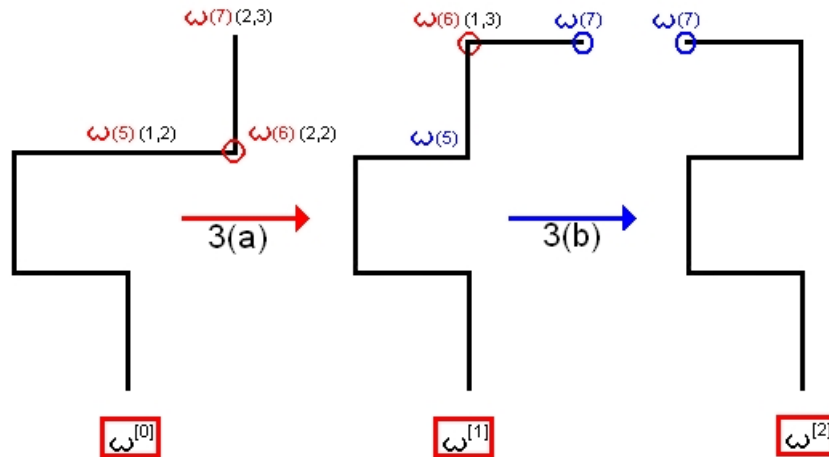
## 4.2 Monte Carlo Markov Keten

Het idee van de Monte Carlo Markov Keten (MCMK) is het volgende. Stel dat  $\pi$  de kansverdeling is op een verzameling  $S$ , dat wil zeggen dat voor alle  $i \in S$  de kansverdeling van  $i$  wordt gegeven door  $\pi(i)$  en er geldt dat  $\sum_{i \in S} \pi(i) = 1$ . De bedoeling is nu dat er een aantal stochastische uitkomsten gegenereerd wordt met deze verdeling  $\pi$ . Dit gebeurt met behulp van een Markovketen die de toestandsruimte  $S$  heeft en waarvan de evenwichtsverdeling gelijk aan  $\pi$  is. Dit wil zeggen dat, door de Markovketen lang te laten lopen de verdeling van deze Markovketen naar  $\pi$  nadert.

De MCMK voor het geval van de zelfmijdende wandelingen zal er als volgt uit zien. De toestandsruimte bestaat uit alle vrije wandelingen, dus  $S = \Omega_n$ . De evenwichtsverdeling moet de uniforme verdeling op het aantal zelfmijdende wandelingen zijn, dus  $\pi(\omega) = c_n^{-1}$  voor alle  $\omega \in \Omega_n$ . De Markovketen start met een zelfmijdende wandeling  $\omega^{[0]}$ . Er wordt een stochastische procedure toegepast op  $\omega^{[0]}$  om deze te veranderen in  $\omega^{[1]}$ . Als  $\omega^{[1]}$  een zelfmijdende wandeling is, dan wordt  $\omega^{[1]}$  de volgende wandeling in de keten, zo niet dan start de procedure opnieuw. Er wordt op deze manier een rij zelfmijdende wandelingen gegenereerd  $\{\omega[n] : n \geq 0\}$  waarvan de verdeling, voor  $n$  heel groot,  $\pi$  zal naderen.

Allereerst wordt een voorbeeld van een algoritme gegeven om de MCMK methode

te illustreren. Vervolgens wordt het een en ander uitgelegd over de eigenschappen van een Markovketen. En er wordt uitgelegd waarom deze eigenschappen essentieel zijn voor het construeren van een zelfmijdende wandeling.



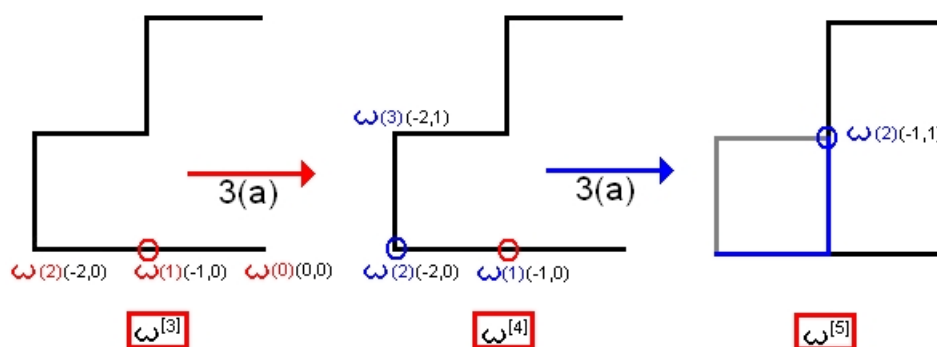
Figuur 4.2: Verdier-Stockmayer Algoritme

1.  $\omega^{[0]}$  is een zelfmijdende wandeling  $\Omega_n$  en  $t = 0$ .
2. Kies een geheel getal  $i$  uniform uit  $\{0, 1, \dots, n\}$ .
3. Definieer een nieuwe wandeling  $\tilde{\omega} = (\tilde{\omega}(0), \dots, \tilde{\omega}(n))$ , niet noodzakelijk-zelfmijdend, als volgt. Allereerst worden  $\tilde{\omega}(l) = \omega^{[t]}(l)$  voor alle  $l \neq i$ . Vervolgens:
  - (a) als  $0 < i < n$ , dan wordt  $\tilde{\omega}(i) = \omega^{[t]}(i-1) + (\omega^{[t]}(i+1) - \omega^{[t]}(i))$ ;
  - (b) als  $i = n$ , dan wordt  $\tilde{\omega}(n)$  een random gekozen buur van  $\omega^{[t]}(n-1)$ , behalve  $\omega^{[t]}(n-2)$  en  $\omega^{[t]}(n)$ .
  - (c) als  $i = 0$  dan wordt  $\tilde{\omega}(0)$  een random gekozen buur van  $\omega^{[t]}(1)$ , behalve  $\omega^{[t]}(0)$  en  $\omega^{[t]}(2)$ . Zorg vervolgens dat  $\tilde{\omega}$  weer in de oorsprong begint.
4. Als  $\tilde{\omega}$  zelfmijdend is, dan wordt  $\omega^{[t+1]} = \tilde{\omega}$ ; anders wordt  $\omega^{[t+1]} = \omega^{[t]}$ .
5. Verhoog  $t$  naar  $t+1$  en ga naar stap 2.

Dit algoritme is ontwikkeld door Verdier en Stockmayer (1962). Figuur 4.2 laat zien wat er verandert aan een zelfmijdende wandeling  $\omega^{[0]}$ . Bij stap 2 in het algoritme wordt allereerst  $i = 6$  gekozen. Vervolgens wordt stap 3(a) uit het algoritme toegepast op  $\omega^{[0]}$  ( $n$  is 7 in dit geval, dus ligt  $i$  tussen 0 en  $n$ ). Om het duidelijker te maken zijn in figuur 4.2 de coördinaten van  $\omega(i)$  in het zwart er naast gezet. Dit geeft in coördinaten

$$\begin{aligned}
\tilde{\omega}(6) &= \omega^{[0]}(5) + \left( \omega^{[0]}(7) - \omega^{[0]}(6) \right), \\
&= (1, 2) + ((2, 3) - (2, 2)), \\
&= (1, 3).
\end{aligned}$$

De wandeling  $\tilde{\omega}$  die ontstaat is zelfmijdend, dus  $\omega^{[1]} = \tilde{\omega}$ . Figuur 4.2 illustreert vervolgens wat er in stap 3 (b) van het algoritme gebeurt, hiervoor wordt  $i$  gelijk aan  $n = 7$  gekozen bij stap 2. Het punt  $\omega(7)$  kan verplaatsen naar alle burenen van  $\omega(6)$ , behalve  $\omega(5)$  en  $\omega(7)$  zelf. Er zijn twee mogelijkheden voor een nieuwe wandeling, het eindpunt wordt verplaatst naar het noorden of het eindpunt wordt verplaatst naar het westen. In de figuur wordt het eindpunt naar het westen verplaatst, waarbij de wandeling  $\omega^{[2]}$  gecreëerd wordt. Bij stap 3 (c) gebeurt hetzelfde als in stap 3 (b), maar in stap 3 (c) wordt de wandeling vervolgens weer naar de oorsprong verplaatst.



Figuur 4.3: Verdier-Stockmayer Algoritme

Figuur 4.3 laat zien dat een wandeling niet altijd verandert door het algoritme. In de wandeling  $\omega^{[3]}$  wordt punt  $i = 1$  gekozen bij stap 2 van het algoritme. Vervolgens wordt stap 3 (a) gedaan:

$$\begin{aligned}
\tilde{\omega}(1) &= \omega^{[3]}(0) + \left( \omega^{[3]}(2) - \omega^{[3]}(1) \right), \\
&= (0, 0) + ((-2, 0) - (-1, 0)), \\
&= (-1, 0).
\end{aligned}$$

Het punt  $\omega(1)$  verandert dus niet en  $\omega^{[4]} = \omega^{[3]}$ . Ook op  $\omega^{[4]}$  wordt in de figuur stap 3 (a) toegepast. Ditmaal wordt  $i = 2$  gekozen en  $\omega(2)$  verandert als volgt:

$$\begin{aligned}
\tilde{\omega}(2) &= \omega^{[4]}(1) + \left( \omega^{[4]}(3) - \omega^{[4]}(2) \right), \\
&= (-1, 0) + ((-2, 1) - (-2, 0)), \\
&= (-1, 1).
\end{aligned}$$

Nu is de wandeling wel veranderd maar hij is niet zelfmijndend, dus wordt in stap 4 van het algoritme  $\omega^{[5]} = \omega^{[4]}$ .

Een goed algoritme moet een Markovketen van zelfmijndende wandelingen genereren zodanig, dat elke wandeling vanuit elke andere wandeling gegenereerd kan worden en elke wandeling gelijke kans heeft om gegenereerd te worden. Dit betekent dat de Markovketen irreducibel en reversibel moet zijn. Deze begrippen worden eerst, aan de hand van een aantal definities die betrekking hebben op Markovketens, uitgelegd. Daarna zal bepaald worden of het Verdier-Stockmayer algoritme aan deze eisen voldoet.

**Definitie 4.1**  $\{X^{[t]} : t = 0, 1, \dots\}$  is een Markov keten op een eindige of aftelbaar oneindige toestandsruimte  $S$  met overgangskansen

$$P(i, j) = P\left(X^{[t+1]} = j | X^{[t]} = i\right), \quad t \geq 0, \quad i, j \in S. \quad (4.2.1)$$

De  $n$ -staps overgangskansen van de keten worden gegeven door

$$P^n(i, j) = P\left(X^{[t+n]} = j | X^{[t]} = i\right), \quad t \geq 0, \quad i, j \in S. \quad (4.2.2)$$

**Definitie 4.2** Een Markovketen is irreducibel als er voor elke  $i$  en  $j$  in  $S$  een  $n > 0$  is zodanig dat  $P^n(i, j) > 0$ .

Dit wil zeggen dat elke toestand  $i$  vanuit elke toestand  $j$  bereikt kan worden. Om de definitie van een reversibele keten te geven moet nog een aantal dingen besproken worden. Allereerst volgt het begrip aperiodiek.

**Definitie 4.3** Een Markovketen heet aperiodiek als de periode  $p$ , oftewel de grootste gemeenschappelijke deler van  $\{n : P^n(i, i) > 0\}$  voor alle  $i$ , gelijk aan 1 is.

Als de Markovketen irreducibel en aperiodiek is dan bestaat de volgende limiet voor alle  $i$  en  $j$  in  $S$ :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^n(i, j) = \pi(j), \quad (4.2.3)$$

waarbij de limiet onafhankelijk is van  $i$ . Nu is genoeg informatie gegeven om de definitie van reversibel te formuleren.

**Definitie 4.4** Een keten is reversibel ten opzichte van  $\pi$  als

$$\pi(i) P(i, j) = \pi(j) P(j, i) \text{ voor alle } i, j \in S. \quad (4.2.4)$$

Als  $\pi$  de uniforme verdeling is, dan geldt dat  $\pi(i) = \pi(j)$ . Dan is reversibel equivalent met de symmetrie van  $P$ :

$$P(i, j) = P(j, i) \quad \text{voor alle } i, j \in S. \quad (4.2.5)$$

De Markovketen die gegenereerd wordt door het Verdier-Stockmayer algoritme is reversibel ten opzicht van de uniforme verdeling op  $\Omega_n$ . Om dit te laten zien is het voldoende te bewijzen dat  $P$  symmetrisch is:

$$P(\omega, \omega') = P(\omega', \omega) \quad \text{als } \omega \neq \omega'. \quad (4.2.6)$$

Stel dat  $\omega$  en  $\omega'$  twee wandelingen in  $\Omega_n$  zijn, die ongelijk aan elkaar zijn en stel dat  $P(\omega, \omega')$  de kans geeft dat de wandeling  $\omega$  verandert in  $\omega'$ . Als  $P(\omega, \omega') = 0$  en  $P(\omega', \omega) = 0$ , dan geldt (4.2.6). Dus zonder verlies van algemeenheid kan gesteld worden dat  $P(\omega, \omega') > 0$ . Dit wil dus zeggen dat, als er gestart wordt in  $\omega$ , dat er een unieke  $i$  is waarvoor in stap 3 van het algoritme de wandeling  $\tilde{\omega}$  gelijk is aan  $\omega'$ . Noem deze  $i = i[\omega, \omega']$  en bekijk de kans dat een punt  $i$  gekozen wordt:  $P(i = i[\omega, \omega']) = \frac{1}{n+1}$ . De kans  $P(\omega, \omega')$  is de kans dat punt  $i$  gekozen wordt, vermenigvuldigt met de kans dat de operatie op deze  $i$  de wandeling  $\omega$  in  $\omega'$  verandert. Als  $0 < i[\omega, \omega'] < n$ , dan wordt stap 3(a) uit het algoritme gedaan en dan is er maar één mogelijkheid om van  $\omega$  in  $\omega'$  te veranderen en is de kans dat deze gekozen wordt gelijk aan 1.

Als  $i = 0$  of  $i = n$  dan zijn er meerdere mogelijkheden. In het geval van  $i = 0$  kan gekozen worden uit alle burens van het volgende punt behalve  $i = 0$  en  $i = 2$ . En in het geval van  $i = n$  kan gekozen worden uit alle burens van het vorige punt behalve de punten  $i = n$  en  $i = n - 2$ . Dus in beide gevallen is er keuze uit  $2d - 2$  burens. Dit geeft de kans

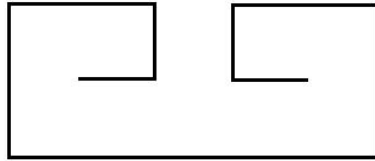
$$P(\omega, \omega') = \begin{cases} \frac{1}{n+1} & \text{als } 0 < i[\omega, \omega'] < n \\ \frac{1}{(n+1)(2d-2)} & \text{als } i[\omega, \omega'] = 0 \text{ of } n \text{ is.} \end{cases} \quad (4.2.7)$$

Als  $\omega$  in  $\omega'$  kan veranderen dan moet dit ook andersom kunnen. Als het algoritme nader bekeken wordt, dan kan snel geconcludeerd worden dat derhalve geldt dat  $i[\omega, \omega'] = i[\omega', \omega]$ . Daarom is ook

$$P(\omega', \omega) = \begin{cases} \frac{1}{n+1} & \text{als } 0 < i[\omega, \omega'] < n \\ \frac{1}{(n+1)(2d-2)} & \text{als } i[\omega, \omega'] = 0 \text{ of } n \text{ is.} \end{cases} \quad (4.2.8)$$

Het Verdier-Stockmayer algoritme is dus reversibel ten opzichte van de uniforme verdeling op  $\Omega_N$ . Maar het is helaas niet irreducibel. Dit is gemakkelijk te laten zien aan de hand van een voorbeeld. Figuur 4.4 geeft een wandeling die nooit veranderd wordt door het algoritme.

Met dit algoritme wordt dus een Markovketen geconstrueerd waarvan de evenwichtsverdeling de uniforme verdeling geeft op alle wandelingen die vanuit de startwandeling gecreeërd kunnen worden. Niet alle wandelingen kunnen voorkomen en ze hebben derhalve de verkeerde verdeling.



Figuur 4.4: Een bevroren wandeling

### 4.3 Pivot algoritme

Een algoritme dat wel irreducibel is, is het Pivot algoritme. Dit algoritme geeft hele goede resultaten omdat het bij elke iteratie zeer grote stukken van de wandeling verplaatst. Hierdoor is er veel meer variatie in de verschillende wandelingen en kan er een goede benadering gevonden worden voor bijvoorbeeld de kritieke exponent  $\nu$ .

Het algoritme doet globaal het volgende: er wordt random een pivotpunt gekozen uit de wandeling. Hier wordt de wandeling in twee stukken gedeeld. Vervolgens wordt er een willekeurig gekozen symmetrische operatie van  $\mathbb{Z}^d$  op het laatste stuk toegepast, met het pivotpunt als oorsprong. Als het resultaat zelfmijdend is wordt, dan de nieuwe wandeling geaccepteerd en anders niet.

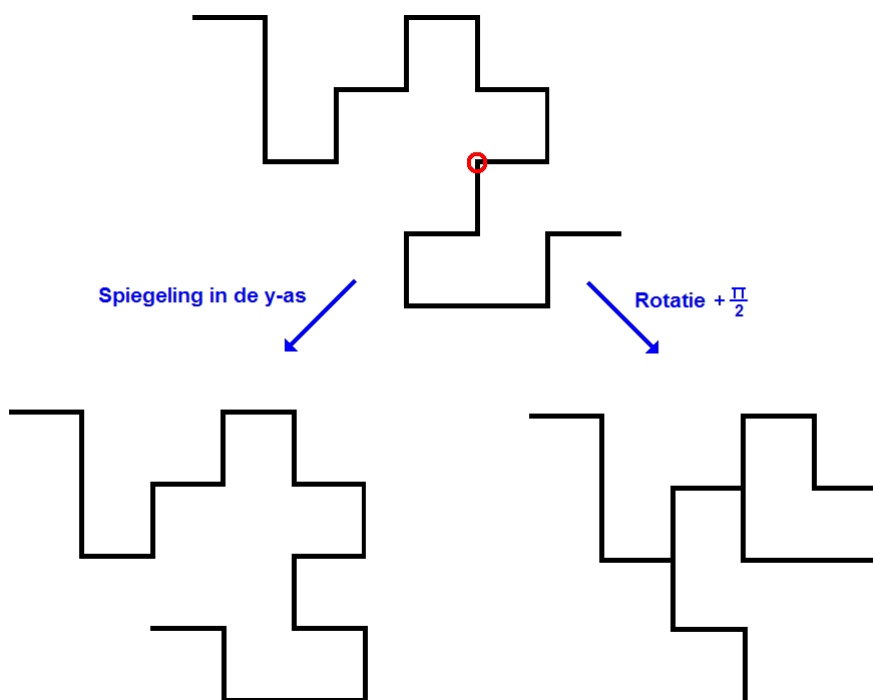
Figuur 4.5 laat een wandeling in  $\mathbb{Z}^2$  zien waar het pivot algoritme op toegepast wordt. In het linker plaatje wordt door middel van de spiegeling in de  $y$ -as een nieuwe zelfmijdende wandeling gemaakt. In het rechter plaatje wordt door een rotatie van  $+\frac{\pi}{2}$  een nieuwe wandeling gemaakt. Deze is niet zelfmijdend en wordt niet geaccepteerd. Formeel wordt het algoritme als volgt beschreven:

Stel dat  $G_d$  de symmetriegroep van  $\mathbb{Z}^d$  is. Om precies te zijn is  $G_d$  de verzameling orthogonale lineaire transformaties van  $\mathbb{R}^d$  die het rooster  $\mathbb{Z}^d$  invariant laten. Om dit te verduidelijken staan hieronder de acht isometriën waar  $G_2$  in  $\mathbb{Z}^2$  uit bestaat.

- De twee spiegelingen in de horizontale en verticale as.
- De twee spiegelingen in de twee diagonale assen.
- De rotatie over  $\pm\frac{\pi}{2}$  en  $\pi$ .
- De identiteit.

Voor algemene  $d$  wordt een transformatie  $g$  in  $G_d$  bepaald door zijn actie op de  $d$  positieve eenheidsvectoren  $e_1, \dots, e_d$  van  $\mathbb{Z}^d$ . Aangezien  $g(e_i)$  een eenheidsvector van  $\mathbb{Z}^d$  moet zijn, kan  $g$  uniek bepaald worden door een permutatie  $\pi$  van  $\{1, \dots, d\}$  en de getallen  $\epsilon_1, \dots, \epsilon_d = \pm 1$  via de volgende relatie

$$g(e_i) = \epsilon_i e_{\pi(i)}. \quad (4.3.1)$$



Figuur 4.5: Pivot Algoritme

Dus  $G_d$  heeft  $2^d d!$  lineaire transformaties en de oorsprong verandert nooit. Definieer  $g_x$  als volgt:

$$g_x(y) = g(y - x) + x \quad (4.3.2)$$

voor elke  $y \in \mathbb{Z}^d$ . Nu werkt het pivot algoritme als volgt:

Er wordt een Markovketen  $\{\omega^{[t]} : t = 0, 1, \dots\}$  gegenereerd op de toestandsruimte  $\Omega_n$  die reversibel is ten opzichte van  $\Omega_n$ .

1. Stel dat  $\omega^{[0]}$  een zelfmijdende random wandeling is in  $\Omega_n$ . Zet  $t = 0$ .
2. Kies een  $I$  uniform uit  $\{0, 1, \dots, n - 1\}$ . Neem  $x = \omega^{[t]}(I)$  (het pivotpunt). Kies een  $G$  uniform uit  $G_d$ . Nu wordt  $\tilde{\omega}(l) = \omega^{[t]}(l)$  voor elke  $l \leq I$  en  $\tilde{\omega} = G_x(\omega^{[t]}(l))$  voor elke  $l > I$ .
3. Als  $\tilde{\omega}$  zelfmijdend is, dan wordt  $\omega^{[t+1]} = \tilde{\omega}$ ; anders wordt  $\omega^{[t+1]} = \omega^{[t]}$ .
4. Verhoog  $t$  met 1 en ga naar stap 2.

Dat de Markovketen reversibel is ten opzichte van de uniforme verdeling op  $\Omega_n$  is gemakkelijk te bewijzen:



Stel  $\omega$  en  $\omega'$  zijn twee verschillende zelfmijdende wandelingen waarvoor geldt dat  $P(\omega, \omega') > 0$ . Er kunnen verschillende manieren zijn waarop je van  $\omega$  naar  $\omega'$  gaat. Stel dat er  $m$  verschillende paren  $(i^{(j)}, g^{(j)})$  ( $1 \leq j \leq m$ ) zijn zodanig dat, als je de operatie  $g^{(j)}$  toepast op  $\omega$  met pivotpunt  $\omega(i^{(j)})$ , je  $\omega'$  krijgt. Dan is

$$P(\omega, \omega') = \sum_{j=1}^m P(I = i^{(j)}) P(G = g^{(j)}). \quad (4.3.3)$$

Als je de operatie  $(g^{(j)})^{-1}$  toepast op  $\omega'$  met pivotpunt  $\omega'(i^{(j)})$  dan krijg je  $\omega$  terug. Dus zal de kans  $P(\omega, \omega')$  gelijk zijn aan de kans  $P(\omega', \omega)$ .

Het pivot algoritme is ook irreducibel. Het bewijs hiervoor is iets minder makkelijk te geven. Hiervoor wordt verwezen naar Madras en Slade [15].

Madras en Sokal [16] hebben met het pivot algoritme de volgende schatters voor de kritieke exponent gevonden:  $\nu = 0.7496 \pm 0.0007$  voor  $d = 2$  en  $\nu = 0.592 \pm 0.003$  voor  $d = 3$ . Zij gebruikten in  $d = 2$  zelfmijdende wandelingen van lengte  $200 \leq n \leq 10000$  en in  $d = 3$  van lengte  $200 \leq n \leq 3000$ .

## Hoofdstuk 5

# Andere typen wandelingen

In paragraaf 3.2 is de zwakke zelfmijdende wandeling aan bod gekomen en in paragraaf 2.2.2 zijn TAW's, bruggen en irreducibele bruggen behandeld. In dit laatste hoofdstuk wordt ingegaan op nog twee andere soorten wandelingen, de *Lus-uitwissende zelfmijdende wandeling* en de *Bijziende zelfmijdende wandeling*. Hierbij wordt de definitie gegeven en worden enkele resultaten van onderzoek op dit gebied besproken.

### 5.1 Lus-uitwissende wandelingen

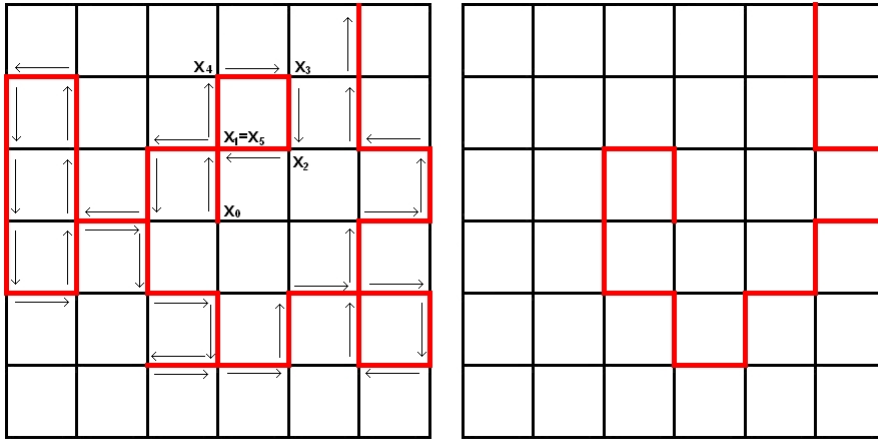
De Lus-uitwissende zelfmijdende wandeling (LUW) kan op twee manieren beschreven worden. Allereerst wordt de manier behandeld waar deze wandeling zijn naam aan te danken heeft. Beschouw een oneindige vrije wandeling op een regelmatig rooster. Deze wandeling wordt chronologisch doorlopen, waarbij gestart wordt in de oorsprong. Op het moment dat er een punt bereikt wordt waar de wandeling zichzelf snijdt, wordt een lus uit de wandeling gewist. Stel dat dit snijpunt  $x$  is en dat dit punt wordt bezocht op tijdstip  $i$  en  $j$ . Dan worden alle punten  $x_k$  met  $i < k < j$  verwijderd uit de wandeling. Er wordt dus een loop weggehaald uit de wandeling. Figuur 5.1 illustreert dit proces in  $\mathbb{Z}^2$ . De linker afbeelding in de figuur is een vrije wandeling, waarbij de pijlen aangeven hoe de wandeling loopt. Punt  $x_1 = x_5$  wordt dubbel bezocht, dus worden de punten  $x_2, x_3$  en  $x_4$  weggehaald uit de wandeling. Hetzelfde gebeurt bij alle andere punten die dubbel bezocht worden. Het resultaat is de zelfmijdende wandeling (rechter afbeelding). Deze methode werkt voor  $d \geq 3$ , omdat de vrije wandeling dan transiënt is. Voor  $d = 2$  is de vrije wandeling recurrent en werkt de methode niet <sup>1</sup>.

De tweede formulering van het model, de zogenaamde Laplaciaanse zelfmijdende wandeling, is een stochastisch proces beschreven door overganskansen. Ook bij dit model geeft  $d = 2$  problemen, dus wordt alleen  $d \geq 3$  bekeken. Om het model exact te beschrijven wordt de volgende definitie gegeven:

**Definitie 5.1** *Gegeven een punt  $x \in \mathbb{Z}^d$  een verzameling  $A \subset \mathbb{Z}^d$ , definieer*

---

<sup>1</sup>Voor een bewijs dat de vrije wandeling in  $d = 3$  transient en in  $d = 2$  recurrent is wordt verwezen naar Lawler (1988) [5]



Figuur 5.1: Links vrije wandeling, rechts de bijbehorende Lus-uitwissende wandeling.

$Q_A(x)$  als de kans dat een oneindige vrije wandeling startend in  $x$  nooit in  $A$  komt.

De overgangskansen van de Laplacianse wandeling worden gegeven door

$$P(\omega(n+1) = x | \omega) = \frac{Q_\omega(x)}{\sum_{y:|y-\omega(n)|=1} Q_\omega(y)}, \quad (5.1.1)$$

voor  $\omega = \{\omega(0), \dots, \omega(n)\}$  en  $x$  een buur van  $\omega(n)$ . Dus de kans dat het volgende punt in de zelfmijdende wandeling  $x$  is, is gelijk aan de kans dat een wandeling startend in  $x$  nooit in  $\omega$  komt gedeeld door de kans dat een wandeling startend in een punt  $y$ , dat een buur van  $\omega$  is, nooit in  $\omega$  komt. Dat dit equivalent is met de lus-uitwissende wandeling wordt bewezen in Lawler (1991) [14].

Lawler heeft veel onderzoek gedaan naar de LUW. Hij heeft bewezen dat een LUW zich gedraagt als een vrije wandeling in  $d > 4$ . Als  $R_n$  de positie van een wandelaar aangeeft na  $n$  stappen, dan geldt dat

$$\langle |R_n^2| \rangle \approx cn \text{ als } n \rightarrow \infty.$$

Hier is  $\langle |R_n^2| \rangle$  de gemiddelde kwadratische afstand, en deze is in grootte orde dezelfde als bij de vrije wandeling. Bovendien blijkt dat de random variabele  $\frac{R_n}{\sqrt{cn}}$  convergeert naar een random variabele met een  $d$ -dimensionale standaard normale dichtheid.

Lawler heeft voor  $d = 4$  laten zien dat er een functie  $b(n)$  bestaat, die minstens zo snel groeit als  $(\log n)^{\frac{1}{3}}$ , zodanig dat

$$\langle |R_n^2| \rangle \approx b(n)n \text{ als } n \rightarrow \infty.$$

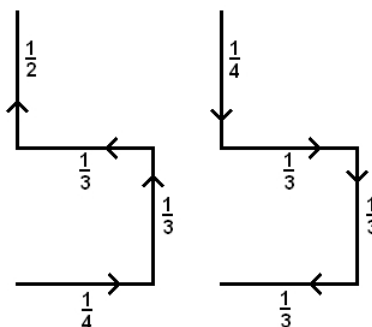
en dat  $[b(n)n]^{-\frac{1}{2}} R_n$  convergeert naar een random variabele met een 4-dimensionale standaard normale dichtheid.

Lyklema en Evertz (1986) hebben doormiddel van numerieke methoden gevonden dat  $\langle |R_n^2| \rangle^{\frac{1}{2}}$  in  $d = 2$  bij benadering groeit als  $n^{0.8}$ . Uiteindelijk hebben Guttman en Bursill (1990) meer betrouwbare schatters gevonden:

- $n^{0.800 \pm 0.003}$  voor  $d = 2$ ,
- $n^{0.616 \pm 0.004}$  voor  $d = 3$ .

## 5.2 Bijziende zelfmijdende wandeling

De stochastische zelfmijdende de wandeling die in deze scriptie besproken hebben we gedefinieerd door een uniforme kansverdeling op de verzameling van alle zelfmijdende wandelingen. Een andere versie van de zelfmijdende wandeling kan gedefinieerd worden door een stochastisch proces met overgangskansen. Deze zelfmijdende wandeling wordt de Bijziende zelfmijdende wandeling genoemd.



Figuur 5.2: Het gewicht dat aan een myopic wandeling wordt toegekend.

In hoofdstuk 4 is het MSAW-algoritme besproken. Dit algoritme en het model voor de Bijziende zelfmijdende wandeling zijn op één punt na hetzelfde. De overgangskansen van de Bijziende zelfmijdende wandeling worden als volgt gedefinieerd. Beschouw een wandelaar op  $\mathbb{Z}^d$ , die start in de oorsprong en zich naar al zijn naaste burens kan begeven. In de eerste stap kiest de wandelaar het volgende punt met kans  $(2d)^{-1}$ . In de stappen daarna kiest de wandelaar uit de naaste burens die nog niet bezocht zijn uniform één naaste buur. Als alle naaste burens bezocht zijn, dan kiest de wandelaar uniform uit alle naaste burens die het minst vaak bezocht zijn. Op dit punt verschilt de Bijziende zelfmijdende wandeling met het MSAW-algoritme. Het laatste algoritme stopt namelijk op het moment dat alle burens bezocht zijn.

Het gewicht dat op deze wijze aan een zelfmijdende wandeling gegeven wordt is anders dan bij een gewone zelfmijdende wandeling. Dit gebeurt net als in het MSAW-algoritme: een wandeling die ONWN loopt krijgt het gewicht  $\frac{1}{4} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{2} = \frac{1}{72}$ , terwijl een gewone zelfmijdende wandeling het gewicht  $\frac{1}{c_n} = \frac{1}{100}$  krijgt. Een ander aspect is dat de wandelingen niet symmetrisch zijn ten opzichte van

de tijd. Dit betekent dat een wandeling niet hetzelfde gewicht hoeft te hebben als een wandeling die tegengesteld loopt. De eerste wandeling in figuur 5.2 heeft als gewicht  $\frac{1}{72}$ , terwijl de tegengestelde wandeling gewicht  $\frac{1}{108}$  heeft.

Er zijn nog geen wiskundig harde resultaten voor het kritieke gedrag van de Bijziende wandeling gevonden. Duidelijk is wel dat dit gedrag anders is dan bij de gewone zelfmijdende wandeling.

# Conclusie

Er zijn twee vragen die in deze scriptie beantwoord zijn. Allereerst de vraag:

1. Hoeveel zelfmijdende wandelingen van  $n$  stappen,  $c_n$ , zijn er?

Gebleden is dat er geen exact antwoord bekend is voor alle  $n$  en  $d$  is. Wel is er veel bekend over het asymptotisch gedrag van  $c_n$ . Er geldt dat

$$\lim_{n \rightarrow \infty} c_n^{\frac{1}{n}} = \mu,$$

voor een zekere  $\mu$ . Deze  $\mu$ , de connectiviteitsconstante, is niet exact bepaald. Er zijn wel grenzen voor  $\mu$  bekend. De beste ondergrens van  $\mu$  in  $d = 2$  hebben Guttmann en Conway [3] bepaald. Zij deden dit met behulp van de irreducibele brug methode van Kesten en vonden  $\mu \geq 2.62002$ . De beste ondergrens voor  $d \geq 3$  is bepaald door Hara en Slade [4] en zij maakten hiervoor gebruik van de loop-erasure methode. De beste bovengrens staat op naam van Alm [4].

De tweede vraag is:

1. Hoe ver is een wandelaar gemiddeld van zijn startpunt na een wandeling van  $n$  stappen ?

Ook op deze vraag is helaas geen exact antwoord te vinden. Er blijkt dat

$$\langle |\omega(n)|^2 \rangle \sim Dn^{2\nu} \quad \text{voor } n \rightarrow \infty.$$

Fisher en Flory (1951) hebben voor de kritieke exponent  $\nu$  een formule afgeleid:

$$\nu = \begin{cases} \frac{3}{d+2} & \text{voor } d \leq 4 \\ \frac{1}{2} & \text{voor } d \geq 5 \end{cases}.$$

Deze waarde van  $\nu$  klopt voor  $d = 1$  (dit is triviaal). Ook voor  $d = 2$  is de waarde correct, hoewel dit nog niet geheel bewezen is. Voor  $d = 3$  is de waarde niet correct. Numerieke methoden geven een iets lagere waarde. Voor  $d = 4$  is de waarde vermoedelijk goed. Numerieke methoden geven hier wel een waarde die heel dichtbij de waarde van Fisher en Flory ligt. Voor  $d > 4$  blijkt te gelden dat  $\nu = \frac{1}{2}$  en dat de zelfmijdende wandeling zich gedraagt als een vrije wandeling.

Door middel van numerieke methoden zijn goede benaderingen gevonden voor  $\mu$  en  $\nu$ . Er wordt gebruik gemaakt van de zogenaamde Monte Carlo methode en dan met name de Monte Carlo Markov Keten (MCMK). Het pivotalgoritme is een voorbeeld van zo'n MCMK en dit algoritme werkt goed.

# Bibliografie

- [1] Brydges DC, and Spencer T, (1985). Self-avoiding walk in 5 or more dimensions. *Communications in Math. Phys.*, **97**:125-148.
- [2] Clisby N, Liang R, Slade G, (2007). Self-avoiding walk enumeration via the lace expansion: tables. (Unpublished, 2007).
- [3] Conway AR, and Guttmann AJ, (1993). Lower bound on the connective constant for square lattice self-avoiding walks. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **26**:3719-3724.
- [4] Fisher ME, and Sykes, (1959). Excluded-volume problem and the Ising model of ferromagnetism. *Phys. Rev.*, **114**:45-58.
- [5] Flory PJ, (1949). The configuration of a real polymer chain. *J.Chem.Phys.*, **17**:303-310.
- [6] Guttmann AJ, (1983). Bounds on connective constants for self-avoiding walks. *J.Phys.A* **16**:2233-2238.
- [7] Hammersley JM, and Morton KW, (1954). Poor man's Monte Carlo. *J. Roy. Stat. Soc. B*, **16**:23-38.
- [8] Hara T, Slade G, (1992a). Self-avoiding walk in five or more dimensions. I. The critical behaviour. *Communications in Math. Phys.*, **147**:101-136.  
Hara T, Slade G, (1992b). The lace expansion for self-avoiding walk in five or more dimensions. *Rev. Math. Phys.*, **4**:235-327.
- [9] Hara T, Slade G, and Sokal AD, (1993). New lower bounds on the self-avoiding walk connective constant. *J. Stat. Phys.*, **72**:479-517.
- [10] Hughes BD, (1995). Random Walks and Random Environments, Volume 1: Random Walks. Oxford Science Publications.
- [11] Kesten H, (1963). On the number of self-avoiding walks. *J. Math. Phys.*, **4**:960-969.
- [12] Kesten H, (1964). On the number of self-avoiding walks. *J. Math. Phys.*, **5**:1128-1137.
- [13] Lawler, GF, (1988). Loop-erased self-avoiding walk in two and three dimensions. *J.Stat.Phys.*, **50**:91-108.

- [14] Lawler, GF, (1991). Intersections of Random Walks. Birkhäuser, Boston.
- [15] Madras N, and Slade G, (1993). The Self-Avoiding Walk. Birkhäuser, Boston.
- [16] Madras N, and Sokal AD, (1988). The pivot algorithm: A highly efficient Monte Carlo method for the self-avoiding walk. *J.Stat.Phys.*, **50**:109-186.
- [17] Slade G, (1995). Bounds on the self-avoiding walk connective constant. *J. Fourier Analysis and Applications*, **41**:526-532.