

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ



ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Τοπολογικές Μέθοδοι για την
Μέτρηση της Διαπλοκής των
Πολυμερών

Ελένη Παναγιώτου

Τριμελής Επιτροπή

Σ. Λαμπροπούλου (Επιβλέπουσα Καθηγήτρια)

Θ. Θεοδώρου

Ν. Καδιανάκης

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ

ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΔΠΜΣ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΕΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ

Αθήνα, Δεκέμβριος 2008

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	8
2	Μέτρα διαπλοκής για ανοικτές και κλειστές αλυσίδες	19
2.1	Καμπύλες στον χώρο.	19
2.2	Αριθμός περιέλιξης	21
2.3	Μέσος αριθμός διασταυρώσεων	29
2.4	Συστροφή	30
2.5	Αριθμός αυτοπεριέλιξης	32
3	Παραμορφώσεις στο χώρο	41
4	Ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων κανονικών τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων.	55
4.1	Μέσος αριθμός διασταυρώσεων ενός τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου	56
4.2	Μέσος αριθμός διασταυρώσεων δύο τυχαίων περιπάτων ή πολυγώνων	68
5	Ο αριθμός περιέλιξης και η συστροφή ομοιόμορφων τυχαίων προσανατολισμένων πολυγώνων σε περιορισμένους χώρους	77
5.1	Τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης και τετραγωνικός αριθμός συστροφής ομοιόμορφων τυχαίων προσανατολισμένων πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο	78

5.2	Διαπλοκή μεταξύ μίας προσανατολισμένης καμπύλης και ενός προσανατολισμένου τυχαίου πολύγωνου σε περιορισμένο χώρο	86
6	Αριθμητικά αποτελέσματα	92
6.1	Μέση τετραγωνική συστροφή και μέση απόλυτη συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου	94
6.2	Μέσος απόλυτος αριθμός περιέλιξης ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο	97
6.3	Μέση απόλυτη τιμή του αριθμού αυτοπερίελξης ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου	99
6.4	Μέσος απόλυτος αριθμός περιέλιξης δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων ίσου βήματος των οποίων τα αρχικά σημεία ταυτίζονται	101
7	Διαπλοκή Πολυμερικών Τηγμάτων	104
8	Συμπεράσματα	110

Περίληψη

Σε αυτή την εργασία, επεκτείνουμε σε ανοικτές αλυσίδες τις έννοιες του αριθμού περιέλιξης (linking number, $Lk(l_1, l_2)$), του αριθμού αυτο-περιέλιξης (self-linking number, $SL(l)$) καθώς και του αριθμού συστροφής (writhe, $Wr(l)$) για κλειστές αλυσίδες. Δείχνουμε ότι οι ορισμοί αυτοί δεν εξαρτώνται από το επίπεδο προβολής των αλυσίδων. Επίσης εξετάζουμε τη συμπεριφορά τους κάτω από ελαστικές παραμορφώσεις στο χώρο, και δείχνουμε ότι για κλειστές αλυσίδες οι αριθμοί περιέλιξης και αυτοπεριέλιξης είναι αναλλοίωτες. Παρ'ότι δεν είναι τοπολογικές αναλλοίωτες για ανοικτές αλυσίδες, δείχνουμε ότι είναι ομοιόμορφα συνεχείς συναρτήσεις υπό στοιχειώδεις παραμορφώσεις των αλυσίδων.

Στη συνέχεια μελετάμε τον μέσο αριθμό περιέλιξης, τον μέσο αριθμό αυτοπεριέλιξης και την μέση συστρόφη ομοιόμορφων και κανονικών τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων. Παραθέτουμε τα γνωστά αποτελέσματα και επιπλέον δείχνουμε ότι ο μέσος τετραγωνικός αριθμός συστροφής ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου μήκους n σε περιορισμένο χώρο είναι της μορφής $O(n^2)$. Για μία δοθείσα κλειστή καμπύλη σε περιορισμένο χώρο αποδεικνύουμε ότι η μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ της καμπύλης αυτής και ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου n κορυφών σε περιορισμένο χώρο είναι της μορφής $O(\sqrt{n})$. Η αριθμητική μας μελέτη επιβεβαιώνει αυτά τα νέα αποτελέσματα και υποδεικνύει ότι ο αριθμός περιέλιξης μεταξύ δύο προσανατολισμένων ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων, n κορυφών το καθένα, είναι της μορφής $O(n)$. Χρησιμοποιούμε αριθμητικές προσομοιώσεις για να διερευνήσουμε την αυξητική τάση των αριθμών περιέλιξης και αυτο-περιέλιξης κανονικών τυχαίων περιπάτων συναρτήσει του μήκους τους. Τέλος, εισάγουμε ένα καινούριο μέγεθος εκτίμησης της διαπλοκής για συλλογές ανοικτών αλυσίδων, τον πίνακα περιέλιξης, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εκτιμήσουμε την διαπλοκή πολυμερικών τηγμάτων.

Summary

In this dissertation, we extend the notions of the linking number ($Lk(l_1, l_2)$), the self-linking number ($SL(l)$) and the writhe ($Wr(l)$) of closed curves. We show that these definitions do not depend on the projection plane of the chains. We also study their behavior under smooth deformations in space, and show that for closed curves the linking number and the self-linking number are topological invariants. These are not invariants for open chains, but we prove that they are uniformly continuous functions under elementary deformations of the chains.

Next we study the mean linking number and the mean writhe of uniform and equilateral random walks and polygons. We present the results known so far and we prove that the mean squared writhe of an oriented uniform random polygon of length n in confined space has a scaling of the form $O(n^2)$. For a given closed curve in confined space we prove that the mean squared linking number of this curve and a uniform random polygon of n edges has a scaling of the form $O(\sqrt{n})$. Our numerical simulations confirm these analytical results and suggest that the mean absolute linking number between two uniform random polygons of length n has a scaling of the form $O(n)$. We use numerical simulations to study the scaling of the linking number and the self-linking number of equilateral random polygons with respect of their number of edges. Finally, we introduce a new measure of entanglement complexity for collections of closed, open or mixed chains, the *linking matrix*, which can be used to measure the entanglement of polymer melts.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την Αναπληρώτρια Καθηγήτρια του Τομέα Μαθηματικών της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Ε.Μ.Π. κυρία Σ. Λαμπροπούλου για την ανάθεση του θέματος αυτής της εργασίας, για τον πολύτιμο χρόνο που διέθεσε και για την ουσιαστική καθοδήγησή της κατά την διάρκεια της προετοιμασίας της.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή Κ. C. Millett του Πανεπιστημίου της California Santa Barbara για την πολύτιμη καθοδήγηση και συνεργασία στα κεφάλαια 4, 5, 6 και 7.

Επίσης, εκφράζω τις θερμές ευχαριστίες μου προς τον κύριο Θ. Θεοδώρου, Καθηγητή της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Ε.Μ.Π. για το αμείωτο ενδιαφέρον του για αυτήν την εργασία και για το κίνητρο που μας έδωσε η ερευνητική του εργασία για να εργαστούμε πάνω σε αυτό το θέμα.

Τέλος, ευχαριστώ θερμά τον Αναπληρωτή Καθηγητή του Τομέα Μαθηματικών της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Ε.Μ.Π., κύριο Ν. Καδιανάκη, για τις εύστοχες παρατηρήσεις που βοήθησαν στη βελτίωση της εργασίας αυτής.

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Ένα τήγμα πολυμερούς μπορεί να αποτελείται από κυκλικά πολυμερή ή από γραμμικά πολυμερή(ανοικτές αλυσίδες). Οι γραμμικές πολυμερικές αλυσίδες είναι μακριά εύκαμπτα μόρια που επιβάλλουν τοπολογικά εμπόδια το ένα στο άλλο, επειδή δεν μπορούν να διαπεράσουν το ένα το άλλο [1]. Αυτά τα τοπολογικά εμπόδια, που αποκαλούνται διαπλοκές, επηρεάζουν την διαμόρφωση και την κίνηση των αλυσίδων μέσα σε ένα τήγμα πολυμερούς και έχουν μελετηθεί χρησιμοποιώντας διάφορα μοντέλα για τα αποτελέσματα των διαπλοκών στα πολυμερή. Ωστόσο, η ακριβής έννοια της διαπλοκής και η μέτρησή της παραμένει αδιευκρίνιστη.

Στην περίπτωση των βιο-πολυμερών, διάφορες κατηγορίες ενζύμων (τοποϊσομεράσες και ένζυμα ανασυνδυασμού που δρουν σε συγκεκριμένη θέση) παράγουν διαφορετικούς τύπους κόμβων ή κρίκων όταν δράσουν σε κυκλικά μόρια DNA. Η ανάλυση αυτών των κόμβων μας δίνει πληροφορία σχετικά με την καθαυτή λειτουργία των χρωμοσωμάτων. Η πλήρης κατανόηση του ποιοι κόμβοι και κρίκοι διαμορφώνονται κατά ανασυνδυασμό που είναι ειδικός για μία θέση μπορεί να βοηθήσει στην κατανόηση των λεπτομερειών αυτής της διαδικασίας [42].

Τα πολυμερή σε διάλυμα είναι εύκαμπτα αντικείμενα και για να καταλάβει κανείς τις διαμορφωτικές τους ιδιότητες μπορεί να κάνει μία διαδικασία ανεύρεσης μέσης τιμής (ολοκληρωτική διαδικασία) στον χώρο των διαμορφώσεων. Ο

Edwards [1],[2] έδειξε ότι η ουσία των διαπλοκών μπορεί να μελετηθεί χρησιμοποιώντας το μοντέλο σωλήνα. Τα τοπολογικά εμπόδια που επιβάλλουν οι γειτονικές αλυσίδες σε μία συγκεκριμένη αλυσίδα περιορίζουν την κίνησή της σε μία σωληνοειδή περιοχή. Η κίνηση μικρής κλίμακας είναι περιορισμένη στην τάξη μεγέθους της διαμέτρου του σωλήνα, και η κίνηση σε μεγάλη κλίμακα γίνεται έρποντας, μία αποτελεσματική μονοδιάστατη διάδοση της αλυσίδας κατά τον άξονα του σωλήνα της. Το μικρότερο μονοπάτι που κατασκευάζεται κρατώντας τα άκρα της αλυσίδας σταθερά ενώ κανείς συνεχώς σφίγγει (συρρικνώνει) την περίμετρο της αλυσίδας, έτσι ώστε το μονοπάτι που προκύπτει να έχει την ίδια τοπολογία σε σχέση με τις άλλες αλυσίδες αλλά και με την ίδια, λέγεται το πρωταρχικό μονοπάτι. Εφαρμόζοντας αυτήν τη κατασκευή για όλες τις αλυσίδες καταλήγουμε σε μία αδροποιημένη (coarse grained) εικόνα του πολυμερικού τήγματος η οποία αποκαλύπτει την μεγάλης κλίμακας τοπολογική υπο-κατασκευή του. Η λεπτομερής (fine grained) τοπολογική πληροφορία μπορεί να αλλάξει και η αδρή (coarse grained) τοπολογική κατασκευή είναι αυτό που μένει μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας. Η τελευταία εκλαμβάνεται ως ένα δίκτυο πρωταρχικών μονοπατιών, το οποίο είναι η βασική δομή του τήγματος.

Για να διερευνήσουμε τις τοπολογικές ιδιότητες των γραμμικών πολυμερών πρέπει να επιλέξουμε μία κατάλληλη αναλυτική αντιμετώπιση. Υπάρχουν δύο προβλήματα που πρέπει να αντιμετωπίσουμε.

- Το πρώτο είναι να σχεδιάσουμε έναν **αλγόριθμο** ο οποίος να προσομοιώνει τον χώρο των πολυγωνικών αλυσίδων, οι οποίες είτε έχουν ένα σταθερό αριθμό ακμών ή ο αριθμός των ακμών τους μπορεί να μεταβάλλεται. Υπάρχουν διάφορα μοντέλα που χρησιμοποιούνται για να προσομοιώσουν ένα σύστημα κυκλικών πολυμερών ή ανοικτών πολυμερικών αλυσίδων [8].

(i) *Τυχαία πολύγωνα (ή περίπατοι) πλέγματος* : Ένα πολύγωνο πλέγματος είναι μία απεικόνιση μίας απλής κλειστής καμπύλης στο επιλεγόμενο πλέγμα (π.χ. το κυβικό πλέγμα). Δηλαδή, είναι μία εναλλασσόμενη ακολουθία κο-

ρυφών και ακμών στο πλέγμα, έτσι ώστε καμία κορυφή του πλέγματος δεν επαναλαμβάνεται και η μηδενική και η τελευταία κορυφή της ακολουθίας ταυτίζονται. Μπορεί κανείς επίσης να το εκλάβει σαν έναν περίπατο, ο οποίος επανεπισκέπτεται την μηδενική του κορυφή στο τελευταίο του βήμα και, κατά τα άλλα, είναι αυτο-αποκλειόμενος[43].

(ii) *Κανονικά τυχαία πολύγωνα (ή περίπατοι)* : Ένα κανονικό τυχαίο πολύγωνο είναι μία κλειστή (κατά τμήματα γραμμική) καμπύλη στον \mathbb{R}^3 όπου όλες οι ακμές που την αποτελούν έχουν ίσο μήκος. Μπορεί κανείς να το εκλάβει σαν έναν τυχαίο περίπατο στον \mathbb{R}^3 ο οποίος επιστρέφει στο αρχικό του σημείο στο τελευταίο βήμα. Σημειώνουμε ότι με πιθανότητα ένα κανονικό τυχαίο πολύγωνο είναι μία απλή κλειστή καμπύλη (δηλαδή δεν έχει αυτο-τομές)[44].

(iii) *Γκαουσιανά τυχαία πολύγωνα (ή περίπατοι)* : ένα Γκαουσιανό τυχαίο πολύγωνο είναι παρόμοιο με ένα κανονικό τυχαίο πολύγωνο, όπου κάθε ακμή είναι ένα Γκαουσιανό τυχαίο διάνυσμα [21].

(iv) *Ομοιόμορφα τυχαία πολύγωνα (ή περίπατοι)* : ένα ομοιόμορφο τυχαίο πολύγωνο είναι μία κλειστή (κατά τμήματα γραμμική) καμπύλη όπου κάθε ακμή του πολυγώνου καθορίζεται επιλέγοντας τυχαία ένα σημείο σε μία σφαίρα σταθερής ακτίνας (ή σε οποιοδήποτε συμπαγές κυρτό όγκο στον τριδιάστατο χώρο), σύμφωνα με την ομοιόμορφη κατανομή [19].

(v) *Μοντέλα μπάλας και σχοινού* : Για να λάβει κανείς υπόψη το γεγονός ότι τα μονομερή καταλαμβάνουν χώρο και εκτοπίζουν άλλα μονομερή, μπορεί να προσθέσει σκληρές μπάλες σε κάθε κορυφή ενός από τα προηγούμενα δύο μοντέλα [45], οπότε ακμές θα φανούν σαν σχοινιά.

(vi) *Μοντέλα με πάχος* : Κανείς μπορεί να παχύνει τις ακμές κανονικών ή Γκαουσιανών τυχαίων πολυγώνων (ή περιπάτων) και να προσέξει αυτές οι παχιές ακμές να είναι ξένες, εκτός γύρω από την κορυφή όπου δύο ακμές συναντώνται [46].

(vii) *Σκωληκοειδείς αλυσίδες* : Αυτό το μοντέλο είναι μία ειδική περίπτωση των προηγούμενων. Οι ακμές των πολυγώνων δεν είναι εντελώς άκαμπτες και

μπορούν να ταλαντεύονται και να κάμπτονται. Αυτό είναι ένα καλό μοντέλο για πολύ δύσκαμπτα μόρια, όπως το DNA δύο χορδών (double stranded DNA)[47].

Ας παρατηρήσουμε τώρα ότι σε όλα τα παραπάνω μοντέλα υπάρχει η πιθανότητα ένα πολύγωνο ή ένας περίπατος να είναι πεπλεγμένα. Η πιθανότητα να είναι πεπλεγμένο ένα κυκλικό πολυμερές (όπως το κλειστό κυκλικό DNA) έχει μελετηθεί στα [10], [43]. Από το [10] γνωρίζουμε ότι η πιθανότητα ένα πολύγωνο n ακμών σε κυβικό πλέγμα να μην είναι πεπλεγμένο τείνει στο μηδέν καθώς το n τείνει στο άπειρο. Αυτό επιβεβαιώνει την υπόθεση των Frisch-Wasserman-Delbruck ότι τα μακριά κυκλικά πολυμερή σε καλό διάλυμα θα είναι πεπλεγμένα με μεγάλη πιθανότητα. Ένα πιο ισχυρό αποτέλεσμα είναι ότι η πιθανότητα ένας οποιοσδήποτε κόμβος οποιοδήποτε αριθμού διασταυρώσεων να εμφανίζεται σαν προσθετός ενός τυχαίου περιπάτου τείνει στο 1 καθώς το n τείνει στο άπειρο [49]. Ωστόσο, η πιθανότητα ένας τυχαίος περίπατος να διαμορφώσει έναν κόμβο με δοθέντα αριθμό διασταυρώσεων τείνει στο μηδέν, καθώς το n τείνει στο άπειρο [49].

Η πιθανότητα τα μόρια πολυμερών να είναι πεπλεγμένα εξαρτάται επίσης από το πόσο το μόριο είναι περιορισμένο γεωμετρικά. Για παράδειγμα, τα μόρια DNA που είναι περιορισμένα σε έναν μανδύα ιών (viral capsids) έχουν πολύ μεγάλη πιθανότητα να είναι πεπλεγμένα και η κατανομή των τύπων κόμβων είναι διαφορετική από την κατανομή των τύπων κόμβων του ελεύθερου DNA σε διάλυμα. Το μοντέλο ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου (URP) [14] χρησιμοποιείται για να διερευνηθεί η πολυπλοκότητα των κόμβων που δημιουργούν οι αλυσίδες πολυμερών σε περιορισμένους όγκους. Κάθε ακμή του τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου καθορίζεται επιλέγοντας τυχαία ένα σημείο σε μία μπάλα σταθερής ακτίνας σύμφωνα με την ομοιόμορφη κατανομή.

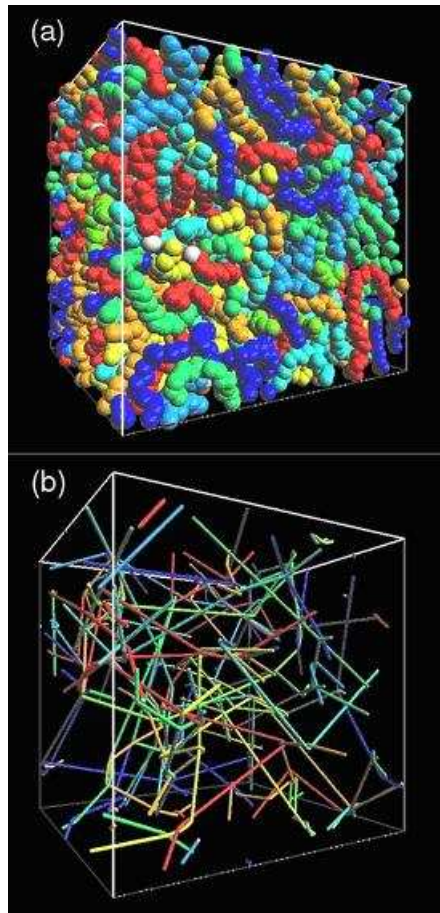
Υπάρχουν ορισμένοι αλγόριθμοι που είναι σχεδιασμένοι για συστήματα με ένα συγκεκριμένο αριθμό ακμών, όπου κανείς θέλει να προσομοιώσει κόμβους στο χώρο όλων των τύπων κόμβων και να εκτιμήσει τη σχετική συχνότητα εμφάνισης διαφορετικών τύπων κόμβων. Κανείς γνωρίζει από την εμπειρία

με την προσομοίωση Μαρκοβιανών αλυσίδων για αυτο-απωθούμενους περιπάτους ότι δεν μπορεί να χρησιμοποιήσει μόνο τοπικές κινήσεις και ότι θα πρέπει να αναζητήσει μία Μαρκοβιανή αλυσίδα που να έχει την δυνατότητα να κάνει μεγάλες αλλαγές στην διαμόρφωση (οι αλυσίδες κινούνται στο χώρο για αυτό ως μία διαμόρφωση configuration εννοείται το πάγωμα μίας αλυσίδας μία χρονική στιγμή). Τέτοιοι αλγόριθμοι είναι: η μέθοδος Pivot[34], μέθοδος περιστροφής Crankshaft [35], η μέθοδος περιστροφής Pairwise Crankshaft [12] και η μέθοδος Hedgehog [17],[18],[33]. Με αυτές τις μεθόδους, τυχαία πολύγωνα παράγονται αλλάζοντας μία αρχική διαμόρφωση.

- Το δεύτερο πρόβλημα ώστε να διερευνήσουμε τις τοπολογικές ιδιότητες γραμμικών πολυμερών είναι να εκτιμήσουμε τη **διαπλοκή** κλειστών και ανοικτών πολυγωνικών αλυσίδων και συλλογών από ανοικτές, κλειστές και ανάμικτες πολυγωνικές αλυσίδες.

Ένα παράδειγμα μίας προσπάθειας να οριστεί, να ποσοτικοποιηθεί και να ελεγχθεί το τι σημαίνει διαπλοκή είναι αυτό που πρότειναν οι Χ. Τζουμανέκας και Δ. Θεοδώρου στο [5]. Ακολουθώντας την οπτική του Edwards, εισήγαγαν τον αλγόριθμο CReTA για την αναγωγή μίας ατομιστικής προσομοίωσης παραγόμενης από υπολογιστή σε ένα «δίκτυο διαπλοκής» πρωταρχικών μονοπατιών (Εικ. 1.1). Τα κομβικά σημεία (κορυφές) είναι οι διαπλοκές και συγκεκριμενοποιούν τη θέση των τοπολογικών εμποδίων, ενώ οι ακμές είναι οι χορδές που ενώνουν τις διαπλοκές. Η συνεκτικότητα του δικτύου συγκεκριμενοποιεί το ποιος είναι πεπλεγμένος με ποιόν και με ποια σειρά. Εξετάζοντας δίκτυα πεπλεγμένων τυχαίων αλυσίδων σκληροειδούς τύπου με πάχος αντίστοιχο με αυτό του πολυαιθυλενίου και του 1,4-πολυβουταδιενίου ολοκληρωτικά ισορροπημένο σε όλες τις κλίμακες μήκους χρησιμοποιώντας ισχυρούς αλγόριθμους εναλλαγής συνδετικότητας Monte Carlo, βασισμένους στην κίνηση end-bridging [6],[7], παρουσιάζουν μικροσκοπικά καθορισμένες κατανομές οι οποίες περιγράφουν στατιστικά την τοπολογική κατάσταση εύκαμπτων τμημάτων πο-

λυμερών.



Σχήμα 1.1: (α) Αντιπροσωπευτικό ατομιστικό δείγμα *PE* (πολυαιθυλενίου) και (β) το αντίστοιχο παραγόμενο δίκτυο

Αν τα πολυμερή είναι κλειστά, έτσι ώστε να διαμορφώνουν ένα σύνολο από κύκλους, κανείς μπορεί να επιτρέψει κινήσεις στο χώρο, όσο οι αλυσίδες δεν επιτρέπεται να διαπεράσουν η μία την άλλη. Οι έννοιες των κόμβων και των κρίκων συλλαμβάνουν θεμελιώδεις ιδιότητες των διαμορφώσεων. Τότε κανείς μπορεί να εφαρμόσει τις γνωστές μεθόδους από την Θεωρία Κόμβων για να

καθορίσει την τοπολογία των πολυμερικών αλυσίδων κυκλικού σχήματος, όπως για παράδειγμα, το πολυώνυμο HOMFLYPT [11, 13], το οποίο μπορεί να αναγνωρίσει πολλούς διαφορετικούς τύπους κόμβων.

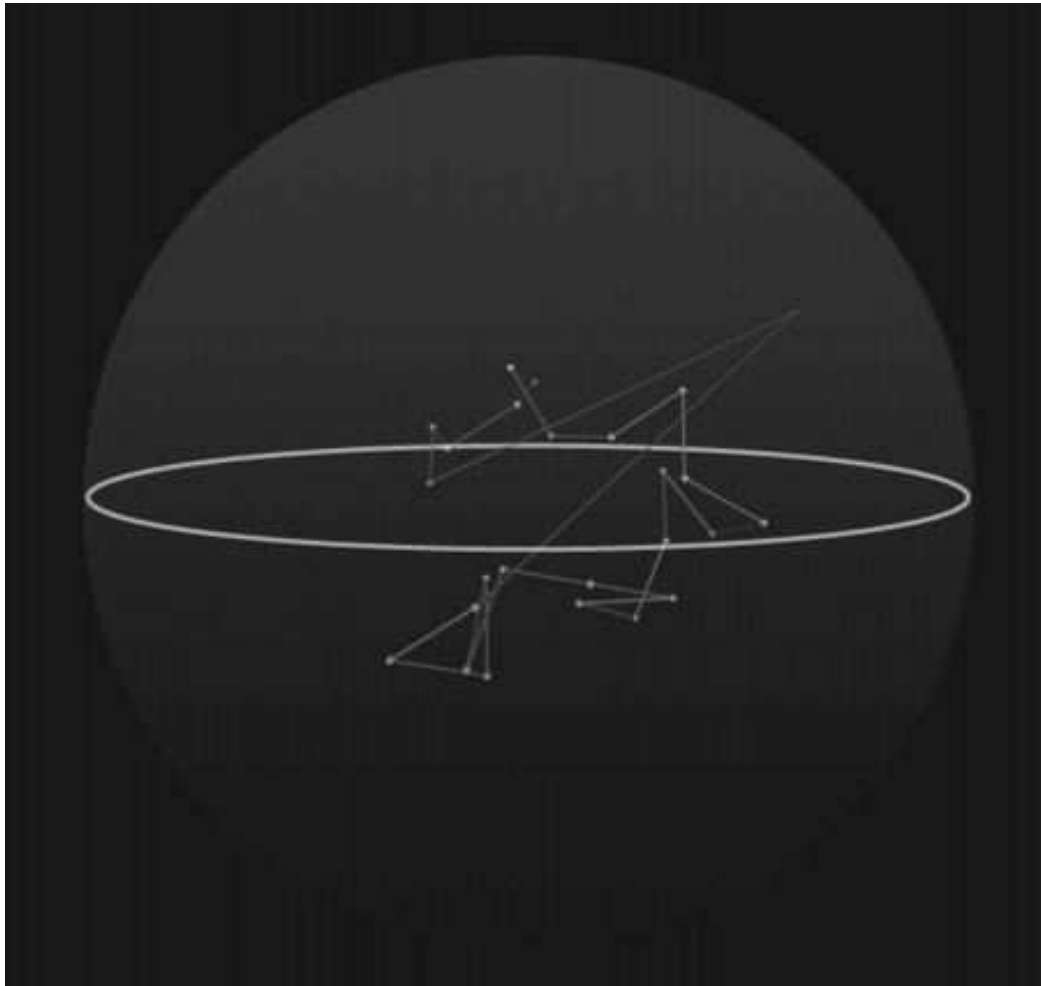
Όμως, οι ανοικτές αλυσίδες πολυμερών μπορούν πάντα να λυθούν, τουλάχιστον σε μεγάλες κλίμακες χρόνου υπό την κίνηση των πολυμερών, και έτσι δεν είναι δυνατόν να ορίσουμε κόμβους ή κρίκους που να είναι αναλλοίωτοι για μία συγκεκριμένη αλυσίδα.

Παρ' όλα αυτά, εάν συμβεί μία αντίδραση κλείσιμου-δακτυλίου (ring-closure reaction), π. χ. με ένα ένζυμο, τότε η διαπλοκή μπορεί να εγκλωβιστεί ως κόμβος στο κυκλικό πολυμερικό μόριο που προκύπτει.

Για παράδειγμα, το γραμμικό DNA μπορεί να μετατραπεί σε κυκλικό DNA μετά από μία αντίδραση κυκλοποίησης. Αυτό μπορεί κανείς να το δει με τη χρήση ηλεκτρονικού μικροσκοπίου. Ο ελαχιστικός αριθμός διασταυρώσεων μπορεί τότε να υπολογιστεί. Μία καταλληλότερη μέθοδος για να καθοριστεί ο αριθμός διασταυρώσεων κόμβων DNA κάνει χρήση της ηλεκτροφόρησης με gel [3], η οποία επιτρέπει να διαχωρίζει κανείς πεπλεγμένο DNA ίσου μήκους ανάλογα σε διαφορετικούς τύπους του κόμβων.

Επιστρέφοντας στα γραμμικά πολυμερή (ανοικτές αλυσίδες), σε αντίθεση με τα κυκλικά πολυμερή, με την κίνηση στο χώρο το μόριο δεν θεωρείται πεπλεγμένο με την τοπολογική έννοια. Παρ' όλα αυτά συνηθίζουμε να αντιλαμβάνομαστε γραμμικά κομμάτια κλωστής σαν να είναι πεπλεγμένα ή να περιέχουν έναν κόμβο. Το ερώτημα που προκύπτει είναι πώς εκλαμβάνουμε την ιδέα της διαπλοκής σε γραμμικά πολυμερή; Κανείς μπορεί να δεχθεί την ιδέα της αμφιβολίας της πεπλεγμένης κατάστασης ανοικτών κλωστών και να χειριστεί (ή να χρησιμοποιήσει) τον πιθανοτικό ορισμό της διαπλοκής.

Συγκεκριμένα, οι K. Millett, A. Dobay και A. Stasiak [15] πρότειναν μία αντιμετώπιση για την αναγνώριση των πεπλεγμένων περιοχών ανοικτών πολυμερών, η οποία είναι πολύ αποτελεσματική. Η μέθοδος συνίσταται στην ανάλυση του φάσματος των κόμβων που διαμορφώνονται μετά από πολλαπλά



Σχήμα 1.2: Μία μη προκατειλημμένη μέθοδος για το κλείσιμο τυχαίων γραμμικών περιπάτων. Επιλέγουμε τυχαία ένα σημείο πάνω σε μία σφαίρα που περικλείει ένα δοθέντα περίπατο και το ενώνουμε με γραμμικά τμήματα με τα δύο άκρα του γραμμικού περιπάτου (τα τμήματα αυτά είναι πολύ μεγαλύτερα από τα ευθύγραμμα τμήματα που αποτελούν τον περίπατο). Σε αυτό το σχήμα, η διάμετρος της σφαίρας μειώθηκε σημαντικά για πρακτικούς λόγους, και επομένως δεν αντικατροπτίζει τις πραγματικές διαστάσεις της αναλυόμενης προσομοιωμένης αλυσίδας ως προς την σφαίρα που την περιέχει [15].

κλεισίματα του ίδιου ανοικτού περιπάτου μέσω τυχαίων σημείων σε μία πολύ μεγάλη σφαίρα που περικλείει τον περίπατο. Το κέντρο βάρους του αναλυόμενου ανοικτού περιπάτου τοποθετείται στο κέντρο μίας μεγάλης σφαίρας που περικλείει τον περίπατο. Στη συνέχεια, ένα τυχαίο σημείο επιλεγμένο πάνω στη σφαίρα αυτή ενώνεται με ευθύγραμμα τμήματα με τα δύο άκρα του αναλυόμενου τυχαίου περιπάτου. Αυτή η διαδικασία κλείνει τον περίπατο σε κόμβο και τον καθιστά υποκείμενο στη γνωστή τοπολογική ανάλυση του κόμβου που προκύπτει, όπως στον υπολογισμό του πολυώνυμου HOMFLYPT. Ας σημειώσουμε ότι διαφορετικές επιλογές σημείου πάνω στη σφαίρα μπορεί να προκαλέσουν διαφορετικούς κόμβους εφόσον τα ευθύγραμμα τμήματα που χρησιμοποιούνται για το κλείσιμο μπορεί να χρειαστεί να περάσουν ανάμεσα από τόξα του πολυμερούς. Κάνοντας αυτήν την διαδικασία επιλογής ενός σημείου τυχαία, στη σφαίρα, σύμφωνα με την ομοιόμορφη κατανομή και καθορίζοντας το πολυώνυμο HOMFLYPT κάθε φορά λαμβάνουμε ένα στατιστικά καλό δείγμα από το οποίο κανείς παίρνει το φάσμα των κόμβων που σχετίζονται με την εν λόγω αλυσίδα και την εν δυνάμει, ταυτοποίηση του κυρίαρχου τύπου κόμβου. Αυτό το χαρακτηριστικό φράγμα πραγματοποιήσιμων κόμβων ορίζει την διαπλοκή μίας «παγωμένης» διαμόρφωσης μίας γραμμικής αλυσίδας. Δείχνεται ότι, στην μεγάλη πλειοψηφία των περιπτώσεων, αυτή η μέθοδος ορίζει καθαρά τον τύπο κόμβου που κυριαρχεί, δηλαδή, την πιο ισχυρή συνιστώσα του φάσματος. Σε αυτές τις περιπτώσεις, το απευθείας από άκρο εις άκρο κλείσιμο δημιουργεί έναν κόμβο ο οποίος συχνά συμπίπτει με τον τύπο του κόμβου που κυριαρχεί στο φάσμα των τυχαίων κλεισμάτων. Στην περίπτωση που έχουμε πολλές αλυσίδες, εφαρμόζοντας πολλαπλά ανεξάρτητα κλεισίματα κάθε κλωστής, ορίζουμε συλλογές από κρίκους (Εικόνα 1.2). Το αντίστοιχο φάσμα κρίκων μπορεί να αναλυθεί χρησιμοποιώντας το πολυώνυμο HOMFLYPT και έτσι ορίζεται ένας τύπος κρίκου που κυριαρχεί.

Ο στόχος της εργασίας αυτής είναι να μελετήσουμε μία επέκταση του αριθμού περιέλιξης σε συλλογές από προσανατολισμένες ανοικτές πολυμερικές αλυσίδες ή ανάμικτες συλλογές ανοικτών και κλειστών πολυμερών, παρέχοντας έτσι ένα αποτελεσματικό και εύκολα υπολογίσιμο μέτρο της διαπλοκής συλλογών από ανοικτά και κλειστά πολυμερή.

Θα θεωρήσουμε ένα τήγμα πολυμερούς, το οποίο το βλέπουμε σαν ένα σύνολο από πεπλεγμένες αλυσίδες. Για να μετρήσουμε τη διαπλοκή τους, θα επιλέξουμε έναν τυχαίο προσανατολισμό για κάθε αλυσίδα. Σημειώνουμε ότι αυτό δεν αλλάζει την απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο αλυσίδων. Θα μοντελοποιήσουμε αυτό το σύνολο από πεπλεγμένες αλυσίδες σαν ένα σύνολο ιδανικών τυχαίων περιπάτων. Ένας ιδανικός τυχαίος περίπατος αποτελείται από ελεύθερα ενωμένα τμήματα ίσου μήκους όπου το καθένα δεν έχει πάχος. Αυτή η κατάσταση δεν είναι ποτέ εντελώς πραγματοποιήσιμη για πραγματικές αλυσίδες, αλλά υπάρχουν μερικοί τύποι πολυμερικών συστημάτων με σχεδόν ιδανικές αλυσίδες. Σε μία ειδική ενδιάμεση θερμοκρασία, επονομαζόμενη "θ-θερμοκρασία", οι αλυσίδες είναι σε σχεδόν ιδανικές διαμορφώσεις, επειδή οι ελκτικές και απωστικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δομικών μονάδων αλληλοαναιρούνται. Οι πολυμερικές αλυσίδες σε καλούς διαλύτες δείχνουν απωστικές διατμηματικές αλληλεπιδράσεις και άρα ακολουθούν κανόνες αυτο-απωκλειόμενων τυχαίων περιπάτων. Σε αυτούς τους περιπάτους τα τμήματά τους δεν πλησιάζουν το ένα το άλλο περισσότερο από μία συγκεκριμένη απόσταση, η οποία αντικατροπτίζει την ισοδύναμη(effective) διάμετρο του πολυμερούς υπό τις δοθείσες συνθήκες. Στο [16] δείχνεται, μέσω αριθμητικών αποτελεσμάτων, ότι όταν ιδανικοί τυχαίοι περίπατοι κατατάσσονται σε διαφορετικούς τύπους κόμβων, η ασυμπτωτική συμπεριφορά των διαστάσεων κάθε τύπου κόμβου είναι η ίδια με αυτή των αυτο-απωθούμενων περιπάτων.

Τα παραπάνω παρουσιάζονται και αναλύονται στο κεφάλαιο 7, όπου ορίζουμε τον πίνακα περιέλιξης σαν ένα μέτρο διαπλοκής ενός συνόλου ανοικτών αλυσίδων και τον υπολογίζουμε για ιδανικούς τυχαίους περιπάτους. Στο κε-

φάλαιο 2 ορίζουμε και εξηγούμε την γεωμετρική ερμηνεία του αριθμού περιέλιξης, του μέσου αριθμού διασταυρώσεων, του αριθμού αυτοπεριέλιξης και της συστροφής κλειστών και ανοικτών αλυσίδων. Στο κεφάλαιο 3 μελετάμε τις ιδιότητες των μεγεθών αυτών καθώς οι αλυσίδες είναι ελεύθερες να κινούνται στο χώρο. Στο κεφάλαιο 4 παραθέτουμε κάποια ενδιαφέροντα θεωρήματα για τον αριθμό διασταυρώσεων ιδανικών περιπάτων και πολυγώνων, ενώ στο κεφάλαιο 5 μελετάμε την διαπλοκή ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο και αποδεικνύουμε για πρώτη φορά τα θεωρήματα 5.1.4, 5.2.5. Στο κεφάλαιο 6 παραθέτουμε τα αριθμητικά αποτελέσματα των προσομοιώσεων κανονικών και ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων τα οποία επιβεβαιώνουν την θεωρητική μας μελέτη.

Κεφάλαιο 2

Μέτρα διαπλοκής για ανοικτές και κλειστές αλυσίδες

2.1 Καμπύλες στον χώρο.

Μία καμπύλη είναι μία διαφορίσιμη συνάρτηση $\gamma : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ από ένα ανοικτό διάστημα I στον \mathbb{R}^3 .

Μία κλειστή καμπύλη χωρίς αυτοτομές ονομάζεται *κόμβος*.

Ένας *κρίκος* με n συριστώσες είναι n κλειστές καμπύλες χωρίς αυτοτομές που δεν τέμνουν η μία την άλλη.

Δύο κόμβοι K_1 και K_2 ή κρίκοι είναι *ισοδύναμοι* αν υπάρχει συνεχής απεικόνιση που απεικονίζει τον κόμβο K_1 και το χώρο που τον περιέχει στον κόμβο K_2 και το χώρο που τον περιέχει.

Ορισμός 2.1.1. Πολυγωνική αλυσίδα είναι μία απεικόνιση $X : [a, b] \rightarrow E^2$ ενός κλειστού διαστήματος πάνω στο ευκλείδειο επίπεδο τέτοια ώστε για κάποια πεπερασμένη υποδιαίρεση, $a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b$, η απεικόνιση X περιορισμένη στο διάστημα $t_i \leq t \leq t_{i+1}$ είναι γραμμική, οπότε σε αυτό το

διάστημα $X(t) = \frac{t_{i+1}-t}{t_{i+1}-t_i}X(t_i) + \frac{t-t_i}{t_{i+1}-t_i}X(t_{i+1})$. Τα σημεία $X(t_i)$ γράφονται εν συντομία X_i και ονομάζονται κορυφές της πολυγωνικής αλυσίδας.

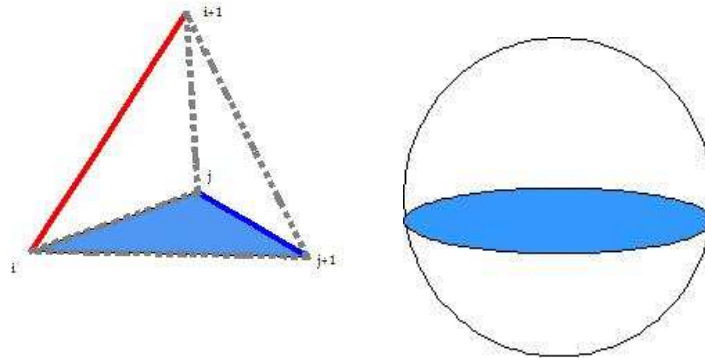
Μία κλειστή πολυγωνική αλυσίδα θα λέγεται *πολύγωνο*.

Ορισμός 2.1.2. Μία προβολή μίας πολυγωνικής καμπύλης λέγεται *κανονική* (generic) αν

(1) υπάρχουν μόνο πεπερασμένα το πλήθος πολλαπλά σημεία, και όλα τα πολλαπλά σημεία είναι *διπλά σημεία*.

(2) καμία κορυφή της καμπύλης δεν απεικονίζεται πάνω σε ένα διπλό σημείο ή πάνω σε άλλη κορυφή ή πάνω σε πλευρά.

Ένα επίπεδο προβολής καθορίζεται από το κάθετο σε αυτό μοναδιαίο διάνυσμα, άρα όλα τα διανύσματα της σφαίρας S^2 αντιστοιχούν σε όλα τα δυνατά επίπεδα προβολής. Ας υποθέσουμε τώρα ότι δύο καμπύλες προβάλλονται πάνω σε ένα επίπεδο κάθετο σε ένα διάνυσμα ξ της S^2 . Παρατηρούμε ότι, αφού οι καμπύλες έχουν πεπερασμένο μήκος, η προβολή τους δεν θα είναι κανονική μόνο για ένα πεπερασμένο πλήθος προβολών οι οποίες ορίζονται από ένα πεπερασμένο πλήθος μεγάλων κύκλων στην S^2 . Πιο συγκεκριμένα έστω δύο τμήματα των καμπυλών $i(i+1), j(j+1)$, σχήμα 2.1. Το ένα τμήμα με μία κορυφή του άλλου σχηματίζουν ένα τρίγωνο $ij(j+1)$ στον χώρο. Ας πάρουμε οποιοδήποτε διάνυσμα \vec{a} με σημείο εφαρμογής το j πάνω στο $ij(j+1)$. Τότε, προβάλλοντας κάθετα στο \vec{a} , θα έχουμε ότι στην προβολή η κορυφή i θα πέσει πάνω στην $j(j+1)$. Όλα αυτά τα μοναδιαία διανύσματα μή επιτρεπών προβολών είναι συνεπίπεδα, άρα βρίσκονται πάνω στον ίδιο μέγιστο κύκλο της S^2 , σχήμα 2.1. Η ένωση αυτών των μεγάλων κύκλων είναι ένα σύνολο μέτρου μηδέν στην S^2 , οπότε με πιθανότητα ένα η προβολή των δύο καμπυλών σε ένα επίπεδο κάθετο σε ένα διάνυσμα ξ στην S^2 θα είναι κανονική.



Σχήμα 2.1: Το ένα τμήμα με μία κορυφή του άλλου σχηματίζουν ένα τρίγωνο $ij(j+1)$ στον χώρο. Τα μοναδιαία διανύσματα μή επιτρεπτών προβολών που ορίζει είναι συνεπίπεδα, άρα βρίσκονται πάνω στον ίδιο μέγιστο κύκλο της S^2

Ορισμός 2.1.3. Μία κανονική προβολή τέτοια ώστε σε κάθε διπλό σημείο να υπάρχει η πληροφορία άνω και κάτω για τα τόξα που διασταυρώνονται ονομάζεται *διάγραμμα του κόμβου* (ή *κρίκου*).

Ο αριθμός διασταυρώσεων των καμπυλών που έχουν προβληθεί σε ένα επίπεδο κάθετο στο ξ είναι ο αριθμός των διπλών σημείων που προκύπτουν.

2.2 Αριθμός περιέλιξης

Έστω δύο προσανατολισμένες καμπύλες στο χώρο l_1, l_2 με παραμετρικοποιήσεις $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$. Έστω ακόμα ένα διάγραμμα του κρίκου που αποτελείται από τις l_1, l_2 ως προς διάνυσμα ξ . Σε κάθε διασταύρωση c_i μεταξύ των l_1, l_2 μία από τις δυνατότητες στην Εικ. 2.2 μπορεί να συμβεί. Από σύμβαση, δίνουμε πρόσημο $+1$ σε μία διασταύρωση του πρώτου τύπου και -1 σε μία διασταύρωση του δεύτερου τύπου. Άρα, για κάθε διάγραμμα ως προς διάνυσμα ξ των l_1, l_2 ορίζεται ένας αριθμός $lk_\xi(l_1, l_2)$ ως το μισό αλγεβρικό άθροισμα των προσήμων των διασταυρώσεων μεταξύ των l_1 και l_2 .



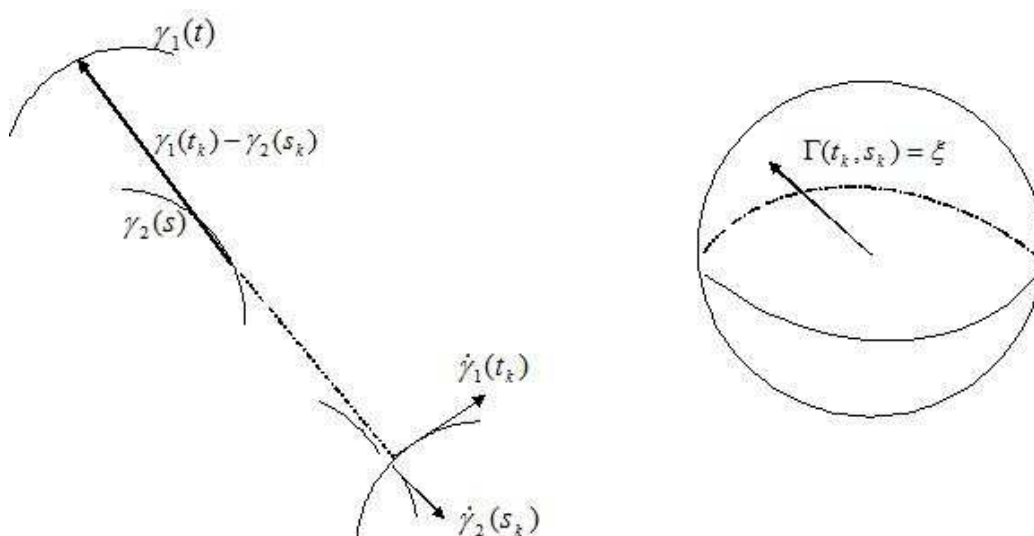
Σχήμα 2.2: (α) Διασταύρωση με πρόσημο +1 και (β) διασταύρωση με πρόσημο -1

$$lk_{\xi}(l_1, l_2) = \frac{1}{2} \sum_{c_i} \text{sign}(c_i) \quad (2.1)$$

όπου c_i διασταυρώσεις μεταξύ των l_1, l_2 .

Έστω τώρα παραμετρικοποιήσεις μήκους τόξου των l_1, l_2 $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ με $(t, s) \in [0, 1] \times [0, 1]$, δηλαδή τέτοιες ώστε $|\dot{\gamma}_1(t)| = 1$ και $|\dot{\gamma}_2(s)| = 1$ για κάθε $(t, s) \in [0, 1] \times [0, 1]$. Στο κάθε (t, s) μπορούμε να αντιστοιχίσουμε το μοναδιαίο διάνυσμα $\Gamma(t, s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|} = \xi$ πάνω στην ευθεία των σημείων $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$. Εάν θεωρήσουμε την προβολή κάθετη στο $\xi = \Gamma(t, s)$, το πλήθος των διπλών σημείων της προβολής θα είναι όσο το πλήθος των ζευγαριών (t_i, s_i) για τα οποία $\Gamma(t, s) \parallel \xi$ ή $\Gamma(t, s) \parallel -\xi$, δηλαδή θα είναι ίσο με την πληθικότητα του συνόλου $\Gamma^{-1}(\xi) \cup \Gamma^{-1}(-\xi)$, Σχήμα 2.3.

Αν οι l_1, l_2 είναι κλειστές καμπύλες τότε ο αριθμός $lk_{\xi}(l_1, l_2)$ είναι ακέραιος, δεν εξαρτάται από το επίπεδο προβολής και μετράει το αλγεβρικό πλήθος των φορών που περιστρέφεται η μία καμπύλη γύρω απ'την άλλη στο χώρο. Αν όμως μία από τις δύο είναι ανοικτή, ο αριθμός $lk_{\xi}(l_1, l_2)$ δεν είναι ακέραιος και μπορεί να μεταβάλλεται από προβολή σε προβολή, άρα δεν είναι καλά ορισμένος για τις καμπύλες l_1, l_2 . Για αυτό θα ορίσουμε τη μέση τιμή τους $L(l_1, l_2)$ (που δεν εξαρτάται από την προβολή). Για το σκοπό αυτό διαμερίζουμε την επιφάνεια της σφαίρας σε πεπερασμένες το πλήθος επιμέρους επιφάνειες εμβαδού A_{ξ} και θεωρούμε ότι το $lk_{\xi}(l_1, l_2)$ είναι τοπικά σταθερό στην επιφάνεια A_{ξ} (δηλαδή, θεωρούμε την A_{ξ} επίπεδη άρα ορίζει ένα μοναδικό κάθετο διάνυσμα ξ). Τότε η μέση τιμή $E[lk_{\xi}(l_1, l_2)]$ της διακριτής τυχαίας μεταβλητής $lk_{\xi}(l_1, l_2)$ είναι :



Σχήμα 2.3: Στο κάθε (t, s) μπορούμε να αντιστοιχίσουμε το μοναδιαίο διάνυσμα $\Gamma(t, s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|} = \xi$ πάνω στην ευθεία των σημείων $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$. Εάν θεωρήσουμε την προβολή κάθετη στο $\xi = \Gamma(t, s)$, το πλήθος των διπλών σημείων της προβολής θα είναι ίσο με την πληθικότητα του συνόλου $\Gamma^{-1}(\xi) \cup \Gamma^{-1}(-\xi)$.

$$E[lk_\xi(l_1, l_2)] = \sum_{\xi \in \delta_n} lk_\xi(l_1, l_2) p_\xi \quad (2.2)$$

όπου p_ξ , η γεωμετρική πιθανότητα να επιλέξουμε το διάνυσμα ξ της S^2 , είναι $p_\xi = \frac{A_\xi}{A}$ όπου A_ξ είναι το εμβαδόν της επιφάνειας A_ξ της διαμέρισης και A το εμβαδόν της S^2 . Άρα,

$$E[lk_\xi(l_1, l_2)] = \sum_{\xi \in \delta_n} lk_\xi(l_1, l_2) p_\xi = \sum_{\xi \in \delta_n} lk_\xi(l_1, l_2) \frac{A_\xi}{A} = \frac{1}{A} \sum_{\xi \in \delta_n} lk_\xi(l_1, l_2) A_\xi \quad (2.3)$$

Για ακολουθία διαμερίσεων δ_n της S^2 τέτοια ώστε $\mu(\delta_n) \rightarrow 0$ παίρνουμε το όριο της παραπάνω σχέσης

$$L(l_1, l_2) = \lim_{\mu(\delta_n) \rightarrow 0} E[lk_\xi(l_1, l_2)] \quad (2.4)$$

Αυτό είναι το επιφανειακό ολοκλήρωμα

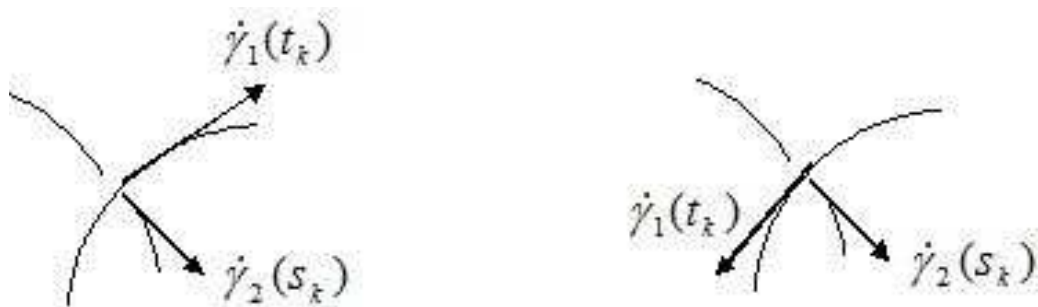
$$L(l_1, l_2) = \frac{1}{4\pi} \iint_{\xi \in S^2} lk_\xi(l_1, l_2) dA \quad (2.5)$$

Προκειμένου τώρα να περάσουμε σε ένα διπλό ολοκλήρωμα για τον τύπο του $L(l_1, l_2)$ σκεπτόμαστε ως εξής:

Για μία διαμέριση D_m του $[0, 1] \times [0, 1]$ μέσω της απεικόνισης $\Gamma : [0, 1] \times [0, 1] \rightarrow S^2$ αντιστοιχεί μία διαμέριση δ_m της S^2 . Για την διαμέριση δ_m έχουμε

$$\begin{aligned} E[lk_\xi(l_1, l_2)] &= \sum_{\xi \in \delta_m} lk_\xi(l_1, l_2) p_\xi \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{\xi \in \delta_m} \frac{1}{2} \sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(\xi) \cup \Gamma^{-1}(-\xi)} \text{sign}(s, t) A_\xi \end{aligned} \quad (2.6)$$

Όμως για κάθε $(s, t) \in \Gamma^{-1}(\xi) \cup \Gamma^{-1}(-\xi)$ είναι $\text{sign}(s, t) A_\xi = \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} \Delta s \Delta t$, διότι $\Gamma(s, t), \frac{\dot{\gamma}_1(t)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|}, \frac{\dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|}$ είναι ανηγμένα στην ίδια μονάδα μήκους και το εξωτερικό γινόμενο των $\frac{\dot{\gamma}_1(t)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|}, \frac{\dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|}$ έχει μέτρο



Σχήμα 2.4: Το $\Gamma(s, t) \cdot (\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s))$ θα είναι $+1$ ή -1 ανάλογα με τις τοπικές θέσεις των δύο καμπύλων.

$\frac{|\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)|}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} = |\sin(\widehat{\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s)})|$. Άρα, το εμβαδόν A_ξ γράφεται συναρτήσει των $\Delta s, \Delta t$ ως $A_\xi = |\sin(\widehat{\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s)})| \Delta s \Delta t$.

Τέλος, το εσωτερικό γινόμενο του $\Gamma(s, t)$ με το μοναδιαίο συγγραμικό του $\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)$ θα είναι $+1$ ή -1 ανάλογα με τις τοπικές θέσεις των δύο καμπύλων, Σχήμα 2.4.

Άρα,

$$\begin{aligned}
 E[lk_\xi(l_1, l_2)] &= \frac{1}{8\pi} \sum_{\xi \in \delta_m} \sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(\xi) \cup \Gamma^{-1}(-\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \\
 &= \frac{1}{8\pi} \sum_{\xi \in \delta_m} \left(\sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(-\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \right) \quad (2.7) \\
 &= \frac{1}{8\pi} 2 \sum_{\xi \in \delta_m} \left(\sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \right) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \sum_{(s,t) \in D_m} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} \Delta s \Delta t
 \end{aligned}$$

Για ακολουθία διαμερίσεων D_m της $[0, 1] \times [0, 1]$ τέτοια ώστε $\mu(D_m) \rightarrow 0$ παίρνουμε το όριο της παραπάνω σχέσης που είναι το διπλό ολοκλήρωμα

$$L(l_1, l_2) = \lim_{\mu(D_m) \rightarrow 0} E[lk_\xi(l_1, l_2)] = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds \quad (2.8)$$

Η παραπάνω ανάλυση εξηγεί τον ορισμό που έδωσε ο αρχικά Gauss για τον αριθμό περιέλιξης.

Ορισμός 2.2.1 (Gauss). Ο αριθμός περιέλιξης κατά Gauss δύο προσανατολισμένων καμπύλων l_1 και l_2 , των οποίων η παραμετρικοποίηση είναι $\gamma_1(t)$, $\gamma_2(s)$ ορίζεται σαν ένα διπλό ολοκλήρωμα πάνω από τις l_1 και l_2 :

$$L(l_1, l_2) = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds \quad (2.9)$$

όπου $(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))$ είναι το μεικτό γινόμενο των $\dot{\gamma}_1(t)$, $\dot{\gamma}_2(s)$ και $\gamma_1(t) - \gamma_2(s)$.

Σύμφωνα με την παραπάνω ανάλυση ο αριθμός $L(l_1, l_2)$ δεν εξαρτάται από το επίπεδο προβολής των l_1 και l_2 και στην περίπτωση που αυτές είναι ανοικτές και στην περίπτωση που αυτές είναι κλειστές.

Στη συνέχεια, θα προσαρμόσουμε τον αριθμό περιέλιξης στην περίπτωση που οι l_1, l_2 είναι δύο πολυγωνικές καμπύλες. Για δύο προσανατολισμένα πολύγωνα $\bar{X} = (X_0, X_1, \dots, X_n)$ και $\bar{Y} = (Y_0, Y_1, \dots, Y_n)$, των οποίων η παραμετρικοποίηση είναι $\gamma_1(t)$, $\gamma_2(s)$ αντίστοιχα, αυτό μπορούμε να το εκφράσουμε σαν

$$\begin{aligned} L(\bar{X}, \bar{Y}) &= \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \end{aligned} \quad (2.10)$$

όπου $l_i(t) = (t-1)X_{i-1} + tX_i$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X_{i-1}X_i$, $l_j(s) = (s-1)Y_{j-1} + sY_j$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $Y_{j-1}Y_j$, και $\dot{l}_i(t) = X_{i-1} + X_i$, $\dot{l}_j(s) = Y_{j-1} + Y_j$.

Παρατήρηση 2.2.2. (i) Ο αριθμός περιέλιξης ισούται με τον αλγεβρικό αριθμό των φορών που η καμπύλη γ_2 περνά μέσα από την επιφάνεια S_1 με την γ_1 ως περίμετρο [28].

(ii) Για δύο κλειστές καμπύλες ο αριθμός περιέλιξης μπορεί να εκφραστεί σαν τον βαθμό της απεικόνισης $\Gamma(t, s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|}$ από τον τόρο στην σφαίρα [29].

Ο αριθμός περιέλιξης δύο προσανατολισμένων καμπυλών έχει τις παρακάτω ιδιότητες :

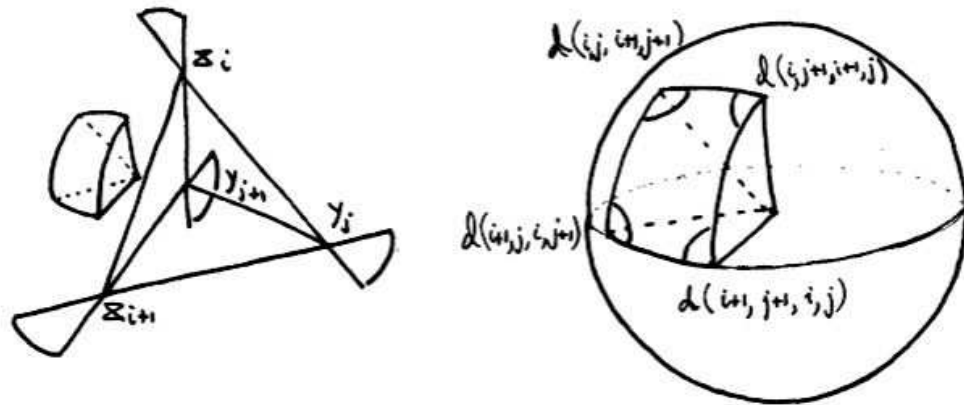
(i) το $L(l_1, l_2)$ ισούται με το μισό αριθμό των διασταυρώσεων με πρόσημο των δύο καμπύλων όπως είναι ορατό σε οποιαδήποτε κανονική προβολή.

(ii) το $L(l_1, l_2)$ είναι ανεξάρτητο από τον προσανατολισμό των καμπύλων. (Για δύο τυχαίες καμπύλες, ο $L(l_1, l_2)$ αλλάζει πρόσημο εάν μία από τις δύο καμπύλες αλλάξει τον προσανατολισμό της.)

Ο υπολογισμός του ολοκληρώματος Gauss μπορεί να είναι επίπονος, για αυτό θα δούμε τώρα ένα παράδειγμα απλού τρόπου υπολογισμού του αριθμού περιέλιξης δύο ακμών l_1, l_2 .

Παράδειγμα 1 Έστω $e_1 = (X_0, X_1)$ και $e_2 = (Y_0, Y_1)$ Έστω και δύο ακμές με τον προσανατολισμό που επάγει η σειρά των κορυφών (Εικ. 2.5). Ο αριθμός περιέλιξής τους τότε είναι

$$L(e_1, e_2) = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_1(t), \dot{l}_2(s), l_1(t) - l_2(s))}{|l_1(t) - l_2(s)|^3} dt ds \quad (2.11)$$



Σχήμα 2.5: Ο αριθμός περιέλιξης των δύο ακμών είναι ίσος με το μισό του πηλίκου του προσανατολισμένου εμβαδού των δύο αντιδιαμετρικών σφαιρικών γωνιών προς το εμβαδό όλης της σφαίρας [26].

όπου $l_1(t) = te_1$ είναι η παραμετροποίηση της ακμής e_1

$l_2(s) = se_2$ είναι η παραμετροποίηση της ακμής e_2 , και $l'_1 = e_1, l'_2 = e_2$.

Αυτή η ποσότητα αναπαριστά τη γεωμετρική πιθανότητα η ακμή X_0X_1 να τέμνει την ακμή Y_0Y_1 όταν προβληθούν κατά ένα διάνυσμα $\xi \in S^2$ και είναι ίση με το πηλίκου του προσανατολισμένου εμβαδού δύο αντιδιαμετρικών στερεών γωνιών προς το εμβαδό όλης της σφαίρας [26]. Από την Ευκλείδεια γεωμετρία γνωρίζουμε ότι το εμβαδόν ενός κυρτού πολυγώνου n πλευρών ισούται με το ένα όγδοο της σφαίρας επί την υπεροχή του αθροίσματος των γωνιών του υπέρ των $2(n-2)$ ορθών, εκφρασμένο σε ορθές γωνίες, δηλαδή για $n=4$

$$\begin{aligned} E(AB\Gamma\Delta) &= \frac{4\pi}{8} \frac{\hat{A} + \hat{B} + \hat{\Gamma} + \hat{\Delta} - 2(4-2)\frac{\pi}{2}}{\frac{\pi}{2}} \\ &= \hat{A} + \hat{B} + \hat{\Gamma} + \hat{\Delta} - 2\pi \end{aligned} \quad (2.12)$$

Δηλαδή το εμβαδό αυτό μπορεί να εκφραστεί σε όρους των γωνιών του σφαιρικού πολυγώνου, και κάθε τέτοια γωνία είναι μία διέδρη γωνία του τετραέ-

δρου με κορυφές $X_0X_1Y_0Y_1$. Θέτουμε $d(i, j, k, l) = \eta$ διεδρη γωνία από το τρίγωνο $X_iX_kY_j$ προς το τρίγωνο $X_iY_jY_l$ στην ακμή X_iY_j . Τότε έχουμε

$$\begin{aligned} L(e_1, e_2) &= \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_1(t), \dot{l}_2(s), l_1(t) - l_2(s))}{|l_1(t) - l_2(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} c_{12} (-2\pi + d(0, 0, 1, 1) + d(1, 0, 0, 1) + d(1, 1, 0, 0) + d(0, 1, 1, 0)). \end{aligned} \quad (2.13)$$

όπου c_{12} είναι το πρόσημο της τομής ανάμεσα στις ακμές e_1 και e_2 σε οποιαδήποτε προβολή τέμνονται.

Παρατήρηση 2.2.3. Ο παραπάνω τύπος για τον αριθμό περιέλιξης δύο προσανατολισμένων ακμών, δεν μας δίνει έναν ακέραιο αριθμό, αφού το προσανατολισμένο εμβαδό των δύο αντιδιαμετρικών στερεών γωνιών στις οποίες οι δύο ακμές τέμνονται είναι αυστηρά μικρότερο από 4π . Σημειώστε επίσης ότι δεν μπορεί να είναι ίσο με το μηδέν, επειδή το εμβαδόν που ορίζεται από δύο μη-παράλληλες ακμές μη μηδενικού μήκους σε μία απόσταση d θα είναι πάντα μεγαλύτερο του μηδενός. (Από την Ευκλείδεια γεωμετρία γνωρίζουμε ότι το άθροισμα όλων των γωνιών ενός σφαιρικού πολυγώνου με τέσσερις ακμές υπερβαίνει τις 4 ορθές και είναι μικρότερο των 12 ορθών).

2.3 Μέσος αριθμός διασταυρώσεων

Στο [48] δείχνεται ότι ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων $a(l_1, l_2)$ μεταξύ δύο ακμών l_1 και l_2 δίνεται από

$$a(l_1, l_2) = \frac{1}{4\pi} \int_s \int_t \frac{|(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))|}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds, \quad (2.14)$$

όπου γ_1 και γ_2 είναι οι παραμετρικοποιήσεις του μήκους τόξου των l_1 και l_2 αντίστοιχα.

Έστω $X = (X_0, X_1, \dots, X_n)$ μία προσανατολισμένη πολυγωνική αλυσίδα σε γενική θέση και $\gamma(t)$ η παραμετροποίησή της.

Τότε ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων μίας προσανατολισμένης ανοικτής αλυσίδας, χ_n ορίζεται ως [17]

$$\chi_n = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} a(l_i, l_j) \quad (2.15)$$

όπου $a(l_i, l_j)$ είναι ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ των ακμών l_i και l_j του X .

Ομοίως, έστω $X = (X_0, X_1, \dots, X_n)$ και $Y = (Y_0, Y_1, \dots, Y_n)$ δύο πολυγωνικές αλυσίδες σε γενική θέση και $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ η παραμετροποίηση της X και Y αντίστοιχα. Τότε ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων δύο προσανατολισμένων ανοικτών αλυσίδων, χ'_n ορίζεται ως [17]

$$\chi'_n = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} a(l_i, l'_j) \quad (2.16)$$

όπου $a(l_i, l'_j)$ είναι ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ των ακμών l_i και l'_j του X και Y αντίστοιχα.

2.4 Συστροφή

Έστω προσανατολισμένος κόμβος K και έστω διάγραμμα K_ξ στο επίπεδο κάθετο στο ξ . Τότε μπορούμε να ορίσουμε τον αριθμό συστροφής (writhe) του συγκεκριμένου διαγράμματος

$$wr(K_\xi) = \sum_{c_i} sign(c_i) \quad (2.17)$$

όπου c_i διασταύρωση του K_{xi} .

Προφανώς ο αριθμός $wr(K_\xi)$ εξαρτάται από το επίπεδο προβολής. Για αυτό παίρνουμε πάλι τον μέσο όρο ως προς όλες τις δυνατές προβολές, το οποίο καταχρηστικά επίσης θα ονομάσουμε συστροφή, αλλά αυτή τη φορά του κόμβου K και όχι κάποιας προβολής. Γενικότερα ορίζουμε τον αριθμό συστροφής μίας προσανατολισμένης καμπύλης είτε αυτή είναι ανοικτή είτε κλειστή.

Ορισμός 2.4.1. Η συστροφή μίας προσανατολισμένης καμπύλης l , της οποίας η παραμετρικοποίηση κατά μήκος τόξου είναι $\gamma(t)$, ορίζεται από το ολοκλήρωμα κατά Gauss πάνω σε μία κλειστή καμπύλη [9]

$$Wr(l) = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]^*} \int_{[0,1]^*} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds \quad (2.18)$$

όπου $[0, 1]^* \times [0, 1]^* = \{(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1] | x \neq y\}$.

Η συστροφή ενός κόμβου είναι ο μέσος αριθμός από διασταυρώσεις με πρόσημο που μπορεί να δει κανείς καθώς κοιτάζει τον κόμβο από οποιαδήποτε κατεύθυνση στον τρισδιάστατο χώρο. Ολοκληρώνοντας την απόλυτη τιμή της συστροφής παίρνουμε την μέση τιμή του αριθμού διασταυρώσεων, δηλαδή την μέση τιμή των διασταυρώσεων που είναι ορατές από όλες τις κατευθύνσεις στον τριδιάστατο χώρο.

Για ένα προσανατολισμένο πολύγωνο $\bar{X} = (X_0, X_1, \dots, X_n)$ η παραμετρικοποίηση του μήκους τόξου του οποίου είναι γ , μπορούμε να το εκφράσουμε αυτό σαν

$$\begin{aligned} Wr(\bar{X}) &= \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \end{aligned} \quad (2.19)$$

όπου $l_i(t) = (t-1)X_{i-1} + tX_i$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X_{i-1}X_i$, $l_j(s) = (s-1)X_{j-1} + sX_j$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X_{j-1}X_j$, και $\dot{l}_i(t) = X_{i-1} + X_i$, $\dot{l}_j(s) = X_{j-1} + X_j$.

Η συστροφή μίας προσανατολισμένης ανοικτής ή κλειστής καμπύλης έχει τις παρακάτω ιδιότητες [36]:

(i) το $Wr(l)$ ισούται τον αριθμό των θετικών διασταυρώσεων της καμπύλης με τον εαυτό της μείον τον αριθμό των αρνητικών διασταυρώσεων της καμπύλης με τον εαυτό της, ολοκληρωμένον ως προς όλες τις δυνατές γωνίες προβολής (δηλαδή όλες τις προβολές στην σφαίρα S^2).

(ii) το $Wr(l)$ είναι ανεξάρτητο του προσανατολισμού της καμπύλης.

2.5 Αριθμός αυτοπεριέλιξης

Ορισμός 2.5.1. Ο αριθμός αυτοπεριέλιξης (*self-linking number*) μίας προσανατολισμένης καμπύλης l , της οποίας η παραμετροποίηση είναι $\gamma(t)$, ορίζεται [22] μέσω του ολοκληρώματος κατά Gauss πάνω στο $[0, 1]^* \times [0, 1]^* = \{(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1] | x \neq y\}$ προσθέτοντας σε αυτό έναν διορθωτικό όρο έτσι ώστε να είναι μία αναλλοίωτη για καθραρισμένους κόμβους [22],[27],[26],

$$SL(l) = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]^*} \int_{[0,1]^*} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds + \int_{[0,1]} \frac{(\gamma'(t) \times \gamma''(t)) \cdot \gamma'''(t)}{|\gamma'(t) \times \gamma''(t)|^2} dt, \quad (2.20)$$

όπου $\tau(t) = \frac{(\gamma'(t) \times \gamma''(t)) \cdot \gamma'''(t)}{|\gamma'(t) \times \gamma''(t)|^2}$ είναι η ολική στρέψη της καμπύλης η οποία μετρά το κατά πόσο μία καμπύλη απέχει από το να είναι επίπεδη.

Για ένα προσανατολισμένο πολύγωνο $\bar{X} = (X_0, X_1, \dots, X_n)$, η παραμετροποίηση του μήκους τόξου του οποίου είναι γ , μπορούμε να το εκφράσουμε το $SL(\bar{X})$ ως

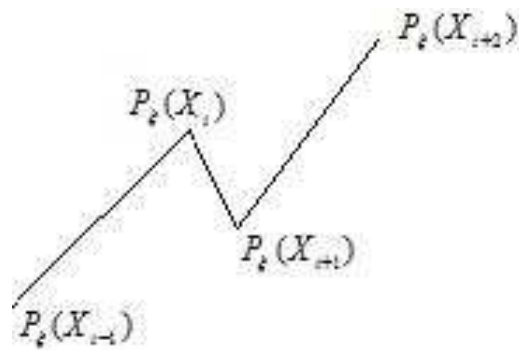
$$\begin{aligned}
SL(\bar{X}) &= \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds \\
&+ \int_{[0,1]} \frac{(\gamma'(t) \times \gamma''(t)) \cdot \gamma'''(t)}{|\gamma'(t) \times \gamma''(t)|^2} dt \Leftrightarrow \\
SL(\bar{X}) &= \frac{1}{4\pi} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \\
&+ \int_{[0,1]} \frac{(\gamma'(t) \times \gamma''(t)) \cdot \gamma'''(t)}{|\gamma'(t) \times \gamma''(t)|^2} dt
\end{aligned} \tag{2.21}$$

όπου $l_i(t) = (t-1)X_{i-1} + tX_i$ είναι η παραμετροποίηση της ακμής $X_{i-1}X_i$, $l_j(s) = (s-1)X_{j-1} + sX_j$ είναι η παραμετροποίηση της ακμής $X_{j-1}X_j$, και $\dot{l}_i(t) = X_{i-1} + X_i$, $\dot{l}_j(s) = X_{j-1} + X_j$.

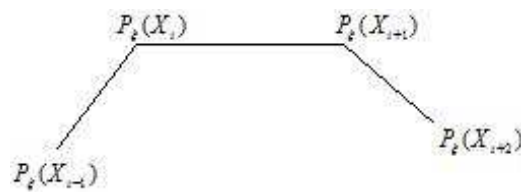
Θα δείξουμε τώρα έναν διαφορετικό τρόπο ερμηνείας και υπολογισμού του διορθωτικού όρου για πολύγωνα. Έστω $X = (X_0, X_1, \dots, X_{m-1})$ ένα πολύγωνο στο χώρο. Θέτουμε $T_i = \frac{X_{i+1} - X_i}{\|X_{i+1} - X_i\|}$ το μοναδιαίο εφαπτόμενο διάνυσμα στην κατεύθυνση της στής ακμής. Θέτουμε $B_i = \frac{T_{i-1} \times T_i}{\|T_{i-1} \times T_i\|}$ να είναι το μοναδιαίο δικάθετο διάνυσμα στο προσανατολισμένο επίπεδο που περιέχει τις δύο ακμές του X στο X_i . Τα διανύσματα B_i και B_{i+1} είναι ορθογώνια στο T_i άρα το $B_i \times B_{i+1}$ είναι πολλαπλάσιο του T_i . Θέτουμε $f_i(X) = \pm 1$ ανάλογα με το πρόσημο του $B_i \times B_{i+1} \cdot T_i$, αποδίδοντας το εάν η i -οστή ακμή έχει αρνητική ή θετική στρέψη. Η γωνία στρέψης $\phi_i(X)$ είναι η προσημασμένη γωνία από το B_i στο B_{i+1} στο προσανατολισμένο επίπεδο που είναι κάθετο στο T_i .

Για κάθε σημείο ξ της S^2 , θέτουμε P_ξ την ορθογώνια προβολή του πολυγώνου. Εάν τα $P_\xi(X_{i-1})$ και $P_\xi(X_{i+2})$ κείνται σε απέναντι πλευρές της γραμμής ανάμεσα των $P_\xi(X_i)$ και $P_\xi(X_{i+1})$, και θέτουμε $F_i(X, \xi) = f_i(X)$ στην πρώτη περίπτωση και $F_i(X, \xi) = 0$ αλλιώς, σχήματα 2.6, 2.7.

Το άθροισμα $F(X, \xi) = \sum_i F_i(X, \xi)$ είναι το αλγεβρικό άθροισμα των ακμών καμπής (inflection edge) του X στην κατεύθυνση ξ .



Σχήμα 2.6: (α) Τα $P_\xi(X_{i-1})$ και $P_\xi(X_{i+2})$ κείνται σε απέναντι πλευρές της γραμμής μεταξύ των $P_\xi(X_i)$ και $P_\xi(X_{i+1})$. Θέτουμε $F_i(X, \xi) = f_i(X)$



Σχήμα 2.7: (β) τα $P_\xi(X_{i-1})$ και $P_\xi(X_{i+2})$ κείνται στην ίδια πλευρά της γραμμής ανάμεσα των $P_\xi(X_i)$ και $P_\xi(X_{i+1})$, και θέτουμε $F_i(X, \xi) = 0$

Στην περίπτωση μίας πολυγωνικής καμπύλης ο όρος $\int_{[0,1]} \tau(t)dt$ μπορεί να γραφτεί ως $\frac{1}{4\pi} \int_{\xi \in S^2} \sum_i F_i(X, \xi) dA$ που αναπαριστά το $F(X_i)$ επί την γεωμετρική πιθανότητα το $P_\xi(X)$ να έχει μία ακμή καμπής στο $P_\xi(X_i - X_{i+1})$ για κάθε ακμή της πολυγωνικής καμπύλης. Στη γραμμή που ορίζουν τα $X_i X_{i+1}$, τα δύο ημιεπίπεδα που περιέχουν τα X_{i-1} και X_{i+2} αντίστοιχα, δημιουργούν μία σφήνα, και η προβολή $P_\xi(X)$ έχει μία ακμή ανάκλασης στο $P_\xi(X_i - X_{i+1})$ αν και μόνο αν το διάνυσμα ξ και $-\xi$ με κέντρο το μέσο της ακμής κείται μέσα στην σφήνα. Το εμβαδόν της ατράκτου πάνω στη σφαίρα είναι ίσο με (δεδέρη γωνία της σφήνας στην $X_i X_{i+1}$) $\frac{4\pi}{2\pi}$. Άρα η πιθανότητα η προβολή της ακμής $X_i X_{i+1}$ του πολυγώνου X ως προς τυχαίο διάνυσμα ξ πάνω στη σφαίρα, $P_\xi(X)$, να είναι μία ακμή ανάκλασης είναι ίση με 2·εμβαδόν ατράκτου που ορίζει η σφήνα. Συμπεραίνουμε ότι $\int_{\xi \in S^2} F_i(X, \xi) dA = 4F(X_i) \cdot (\text{δεδέρη γωνία της σφήνας στη } X_i X_{i+1}) = 4F(X_i) d(i, i+1, i-1, i+2)$. Αλλά το $F(X_i)$ πολλαπλασιασμένο με αυτήν την δεδέρη γωνία είναι ακριβώς η προσημασμένη γωνία $\phi_i(X)$ μεταξύ των διανυσμάτων B_i και B_{i+1} , και άρα

$$\int_{[0,1]} \tau(t)dt = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{2} \int_{\xi \in S^2} \sum_i F_i(X, \xi) dA = \frac{1}{2\pi} \sum_i \phi_i(X) \quad (2.22)$$

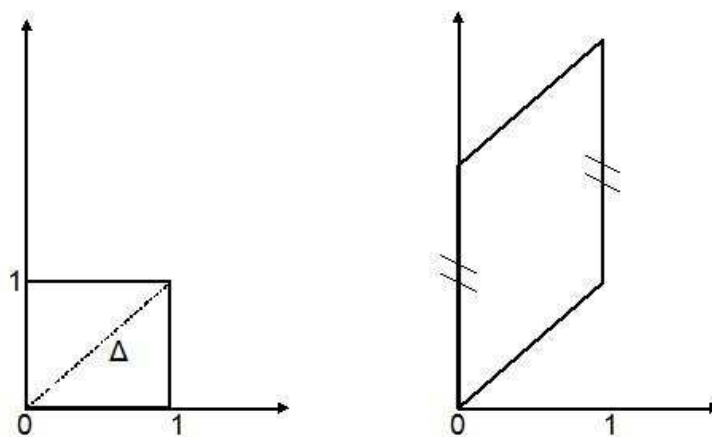
Αυτή η ποσότητα αναπαριστά την συνολική περιστροφή του δικάθετου διανύσματος γύρω από το εφαπτόμενο διάνυσμα $\tau(X) = \sum_i \phi_i(X)$.

Ο αριθμός αυτοπεριέλιξης μίας καμπύλης l έχει τις παρακάτω ιδιότητες [22]:

- (i) το $SL(l)$ ισούται με το μισό του αλγεβρικού αριθμού διασταυρώσεων της καμπύλης με τον εαυτό της όπως φαίνεται σε οποιοδήποτε επίπεδο προβολής.
- (ii) το $SL(l)$ είναι ανεξάρτητο του προσανατολισμού της καμπύλης.

Ένας εναλλακτικός ορισμός του αριθμού περιέλιξης $L(l_1, l_2)$ και του αριθμού αυτοπεριέλιξης $SL(l)$ γίνεται ως εξής. Ας φανταστούμε τον ένα από τους δύο κόμβους l_1 σαν ένα τραινάκι, και ότι εμείς καθόμαστε στο μπροστινό βαγόνι του τραινίου. Σε κάθε σημείο οι ράγες κοιτούν έξω από τον κόμβο στην κατεύθυνση του κάθετου διανύσματος, και καθώς το βαγόνι ταξιδεύει μαζί με τις ράγες, το κεφάλι μας δείχνει πάντα προς τα επάνω. Ας υποθέσουμε ότι το κεφάλι μας είναι ακίνητο σε μία θέση, έτσι ώστε να μπορούμε να κοιτάμε μόνο ευθεία μπροστά. Πού και πού μπορεί να δούμε ένα τμήμα της άλλης συνιστώσας l_2 να βρίσκεται ακριβώς μέσα στο πεδίο ορατότητάς μας. Αυτά τα σημεία ο W. F. Pohl [22] τα ονομάζει *cross tangents* της l_1 ως προς την l_2 . Τα σημεία αυτά τα μετράμε με το κατάλληλο πρόσημο, που εξαρτάται από την κατεύθυνση της συνιστώσας l_2 και την κατεύθυνση στην οποία ταξιδεύουμε. Το τραινάκι σταματάει όταν φτάσουμε στο σημείο εκκίνησης. Τότε ο αριθμός περιέλιξης $L(l_1, l_2)$ ορίζεται ως το μισό του αθροίσματος των προσήμων των *cross tangents* της l_1 ως προς την l_2 .

Ομοίως, ο αριθμός αυτοπεριέλιξης $SL(l)$ ορίζεται ως το μισό του αθροίσματος των προσήμων των *cross tangents* της l ως προς τον εαυτό της. Καθώς κινούμαστε πάνω στην καμπύλη l παραπάνω διαδικασία σίγουρα μετράει το $Wr(l)$, όμως λόγω του ότι το κεφάλι μας είναι ακίνητο η διαδικασία αυτή συμπεριλαμβάνει και την ολική στρέψη της καμπύλης. Αυτός ίσως είναι ο πιο φυσικός ορισμός για τον αριθμό αυτοπεριέλιξης. Χρησιμοποιώντας τον παραπάνω ορισμό είναι εύκολο να δούμε ότι, αν μία λεία καμπύλη l με μη μηδενική κυρτότητα παντού μετακινηθεί κατά μία μικρή απόσταση από τον εαυτό της προς την κατεύθυνση των κύριων κάθετων διανυσμάτων της σε μία νέα καμπύλη l_ϵ , τότε ο αλγεβρικός αριθμός των *cross tangents* της l ως προς τον εαυτό της είναι ίσος με τον αλγεβρικό αριθμό των *cross tangents* της l ως προς την l_ϵ . Δηλαδή ο αριθμός περιέλιξης της l με την l_ϵ είναι ανεξάρτητος του ϵ για ϵ αρκετά μικρό και αυτός ο αριθμός λέγεται αριθμός αυτο-περιέλιξης της l [22], δηλαδή ο αριθμός αυτοπεριέλιξης είναι το $L(l, l_\epsilon)$.



Σχήμα 2.8: Εάν πάρουμε το παραλληλόγραμμο $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y - x \leq 1$ και ταυτίσουμε τις κάθετες πλευρές παίρνουμε το $S(C)$.

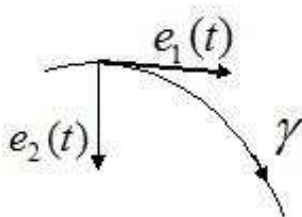
Ορίζοντας τον αριθμό αυτοπεριέλιξης ως το μισό του αλγεβρικού αριθμού των cross tangents της καμπύλης l με τον εαυτό της, παίρνουμε τον τύπο 2.20 ως εξής:

Έστω C ο κύκλος και έστω $\gamma : C \rightarrow E^3$ η παραμετρικοποίηση μίας απλής διαφορίσιμης καμπύλης l τάξης C^1 . Έστω ακόμη $S(C)$ ο χώρος των διευθύνσεων των χορδών που ορίζουν τα ζεύγη σημείων πάνω στον κύκλο C . Ο $S(C)$ είναι μία διαφορίσιμη πολλαπλότητα με σύνορο. Το εσωτερικό του αποτελείται από το $C \times C - \Delta$ όπου $\Delta = (x, x) \subset C \times C$ και το σύνορο είναι το σύνολο των μοναδιαίων εφαπτόμενων διανυσμάτων του C . Το $S(C)$ κατασκευάζεται αντικαθιστώντας στο $C \times C$ το Δ από το σύνολο των μοναδιαίων κάθετων διανυσμάτων σε αυτό. Το αποτέλεσμα μπορεί να αναπαρασταθεί γεωμετρικά κόβοντας το $C \times C$ κατά μήκος του Δ . Ισοδύναμα, βλέπουμε το $C \times C$ σαν το καρτεσιανό επίπεδο modulo σημεία της μορφής (m, n) , m, n ακέραιοι. Το $S(C)$ είναι το παραλληλόγραμμο $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y - x \leq 1$ στο οποίο θεωρούμε ότι οι κάθετες πλευρές ταυτίζονται μέσω της ταύτισης $(0, y) \equiv (1, 1 + y)$ (Εικόνα 2.8).

Σε κάθε $(x, y) \in C \times C - \Delta$ αντιστοιχούμε το μοναδιαίο διάνυσμα $e_1(x, y) \in$

E^3 με κατεύθυνση από το $\gamma(x)$ στο $\gamma(y)$. Σε κάθε $t \in \partial S(C)$ αντιστοιχούμε το μοναδιαίο εφαπτόμενο διάνυσμα $e_1(t) = t$ ως ένα μοναδιαίο διάνυσμα του E^3 . Αυτή η απεικόνιση $e_1 : S(C) \rightarrow S^2$ είναι διαφορίσιμη, όπως έχει αποδειχθεί στο [23]. Σε κάθε $(x, y) \in C \times C - \Delta$ τέτοιο ώστε η εφαπτομένη της γ στο x να μην περνάει από το $\gamma(y)$ (δηλαδή το (x, y) δεν είναι cross tangents) αντιστοιχούμε το $e_2(x, y)$, το μοναδιαίο διάνυσμα στο επίπεδο που ορίζει η εφαπτομένη της γ στο x και το τμήμα $\gamma(x)\gamma(y)$, κάθετο στο $e_1(x, y)$ με κατεύθυνση τέτοια ώστε ο προσανατολισμός του $e_1(x, y) \times e_2(x, y)$ να συμπίπτει με εκείνον του $e_1(x, y) \times \dot{\gamma}(x)$ όπου $\dot{\gamma}(x)$ είναι το θετικό εφαπτόμενο διάνυσμα της καμπύλης στο x . Η διανυσματική συνάρτηση e_2 επεκτείνεται ομαλά και στο σύνορο του $S(C)$ (όπως δείχνεται στο [24]), όπου δίνει το κύριο κάθετο διάνυσμα της γ . Αυτό κείται στην κοίλη πλευρά εκείνης της συνιστώσας του $\partial S(C)$, η οποία αποτελείται από τις αρνητικές εφαπτόμενες, ενώ κείται στην κυρτή πλευρά καθώς προσεγγίζεται μία θετική εφαπτόμενη, δηλαδή μας δίνει την κατεύθυνση προς την οποία στρέφεται η γ σε κάθε σημείο (Εικόνα 2.9). Σημειώνουμε ότι η e_2 δεν είναι καλά ορισμένη στα cross tangents. Θέτουμε τώρα $e_3 = e_1 \times e_2$ και $\omega_{ij} = de_i \cdot e_j$. Τότε, αφού $e_i \cdot e_j = \delta_{ij}$, τα διανυσματικά πεδία e_1, e_2, e_3 αποτελούν ένα πεδίο πλαισίων του \mathbb{R}^3 . Άρα οι ω_{ij} είναι οι μορφές συνοχής του πεδίου πλαισίων e_1, e_2, e_3 , και με διαφορίση βρίσκουμε ότι $\omega_{ij} + \omega_{ji} = 0$. Επεκτείνοντας την $dde_i = 0$, λαμβάνουμε τις εξισώσεις δομής $d\omega_{ij} = \sum_{1 \leq k \leq 3} \omega_{ik} \wedge \omega_{kj}$. Συμπεραίνουμε ότι $dS = \omega_{12} \wedge \omega_{13} = d\omega_{32}$, όπου με τη σφήνα « \wedge » συμβολίζουμε τον πολλαπλασιασμό των μορφών.

Θεωρούμε τώρα τον κανονικό προσανατολισμό στο $C \times C$ ο οποίος επάγει έναν προσανατολισμό στο $S(C)$. Υποθέτουμε ότι η $\gamma(C)$ τέμνει την εφαπτόμενη επιφάνεια (tangent developable), δηλαδή την επιφάνεια που παράγει η ένωση των εφαπτόμενων ευθειών στην καμπύλη, εγγάρσια στα cross tangents. Αυτό εγγυάται ότι θα έχουμε πεπερασμένο πλήθος cross tangents $(x_1, y_1), \dots, (x_M, y_M)$. Περικλείουμε κάθε τέτοιο σημείο σε ένα κουτί $B_{i\epsilon}$ πάχους ϵ στο $C \times C - \Delta \subset S(C)$ και εφαρμόζουμε το Θεώρημα του Stokes



Σχήμα 2.9: Το εφαπτόμενο διάνυσμα e_1 και το κύριο κάθετο διάνυσμα e_2 σε ένα σημείο $t \in \partial S(C)$.

$$\int_{S(C) - \cup B_{i\epsilon}} d\omega_{32} = \int_{\partial S(C)} \omega_{32} + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_i \int_{\partial B_{i\epsilon}} \omega_{32}. \quad (2.23)$$

Τα ολοκληρώματα στον δεύτερο όρο του δεξιού μέλους μας δίνουν τα πρόσημα των cross tangents $\cdot 2\pi$, άρα όλος ο όρος θα είναι ίσος με $4\pi SL$. Τώρα το $\partial S(C)$ αποτελείται από δύο μέρη, τα προς τα εμπρός μοναδιαία εφαπτόμενα διανύσματα $C(1)$ και τα προς τα πίσω εφαπτόμενα διανύσματα $C(2)$. Έστω $T : C \times C - \Delta \rightarrow C \times C - \Delta$ που ορίζεται ως $T(x, y) = (y, x)$. Αυτή η απεικόνιση επεκτείνεται ομαλά σε μία απεικόνιση $T : S(C) \rightarrow S(C)$. Τώρα η T αντιστρέφει τον προσανατολισμό του $C \times C - \Delta$, άρα αντιστρέφει και τον προσανατολισμό του $\partial S(C)$. Είναι προφανές ότι $e_1 T = -e_1$ και, όπως παρατηρήσαμε, στο σύνορο έχουμε $e_2 T = -e_2$. Συνεπώς $e_3 T = e_3$, έτσι ώστε $T^* \omega_{32} = -\omega_{32}$ στο σύνορο. Συνεπάγεται ότι

$$\int_{C(1)} \omega_{32} = \int_{C(2)} \omega_{32}. \quad (2.24)$$

Αλλά τα επιλεγμένα πλαίσια στο $C(1)$ είναι ακριβώς τα πλαίσια Frenet της καμπύλης, έτσι ώστε $\omega_{32} = -\tau ds$ όπου τ είναι η στρέψη της γ και ds είναι το θετικό στοιχειώδες μήκος τόξου της καμπύλης. Ο επαγόμενος προσανατολισμός στο $C(1)$ συμφωνεί με αυτόν της καμπύλης. Άρα

$$\int_{C(1)} \omega_{32} = - \int_C \tau ds. \quad (2.25)$$

Βάσει των παραπάνω και βάσει του γεγονότος ότι $\omega_{12} \wedge \omega_{13} = dS$ είναι το pull-back του στοιχειώδους εμβαδού στην μοναδιαία σφαίρα υπό την απεικόνιση e_1 , μπορούμε να ξαναγράψουμε τη σχέση 2.23 ως εξής:

$$SL = \frac{1}{4\pi} \int_{C \times C} dS + \frac{1}{2\pi} \int_C \tau ds. \quad (2.26)$$

Οπότε, ο πρώτος όρος είναι η συστροφή της καμπύλης, και ο δεύτερος όρος είναι η ολική στρέψη της καμπύλης.

Κεφάλαιο 3

Παραμορφώσεις στο χώρο

Στο προηγούμενο κεφάλαιο ορίσαμε μέτρα διαπλοκής για καμπύλες με τρόπο έτσι ώστε αυτοί οι αριθμοί να μην εξαρτώνται από το επίπεδο προβολής. Πώς συμπεριφέρονται όμως αυτά τα μεγέθη στην περίπτωση που οι καμπύλες αποτελούν ελαστικές παραμορφώσεις στο χώρο·

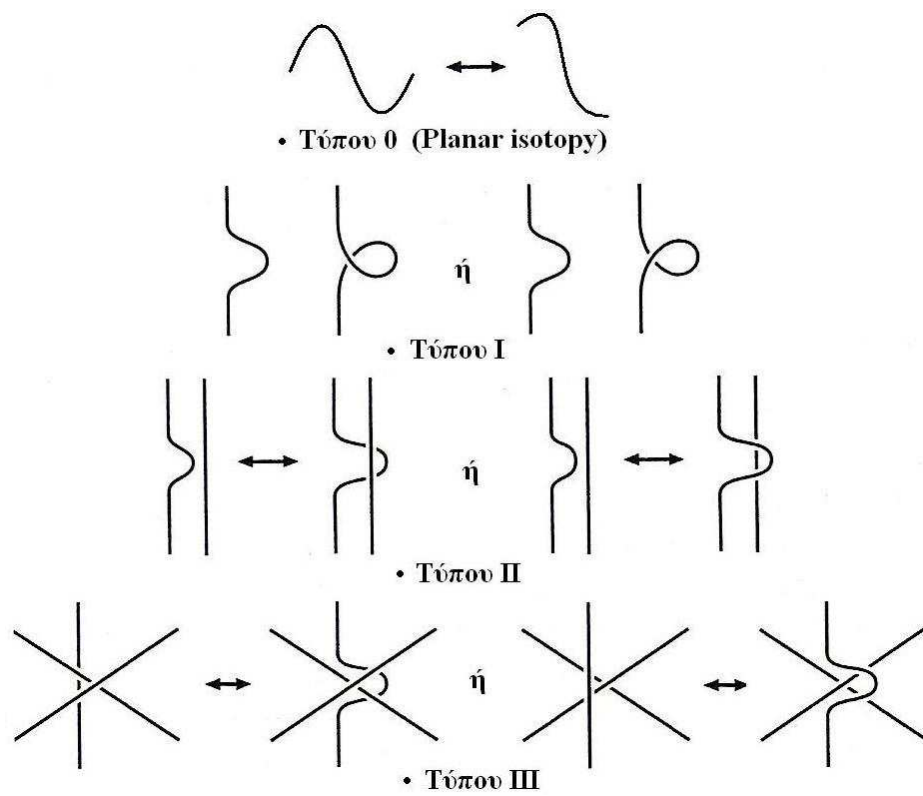
Ορισμός 3.0.2. Δύο κόμβοι ή κρίκοι K_1, K_2 θα λέγονται *ισοτοπικοί* εάν υπάρχει ομοιομορφισμός δηλαδή μία συνεχής αντιστρέψιμη συνάρτηση με συνεχή αντίστροφο) του χώρου τέτοιος ώστε η εικόνα του K_1 να είναι ο K_2 .

Με άλλα λόγια, μία ισοτοπία είναι μία ελαστική (δηλαδή συνεχής) παραμόρφωση του χώρου. Ο κόμβος K_1 μπορεί να θεωρηθεί ως μία ελαστική κλειστή καμπύλη στην οποία δεν επιτρέπονται οι αυτοτομές.

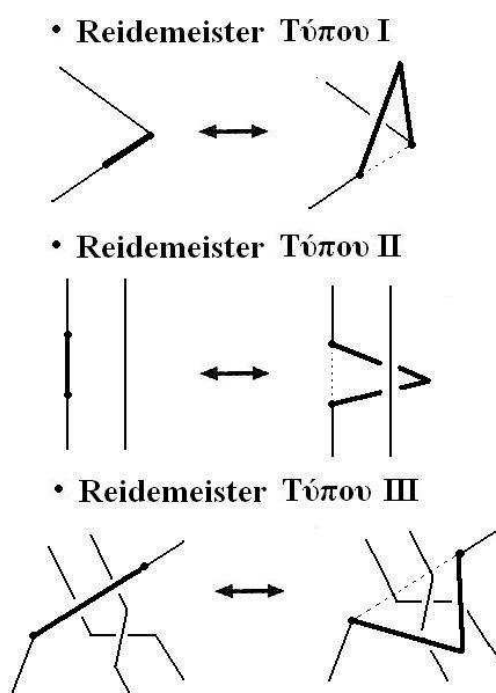
Έχει αποδειχθεί από τον Reidemeister, 1935 ότι δύο κόμβοι K_1, K_2 είναι ισοτοπικοί εάν δύο οποιαδήποτε διαγράμματά τους διαφέρουν κατά ένα πεπερασμένο πλήθος από τις κινήσεις Reidemeister που φαίνονται στην Εικόνα 3.1.

Για πολυγωνικές καμπύλες οι κινήσεις Reidemeister φαίνονται στην Εικόνα 3.2

Ορισμός 3.0.3. Μία *αναλλοίωτη ισοτοπία*ς κόμβων ή κρίκων είναι μία συνάρτηση από το σύνολο των κρίκων τέτοι ώστε αν δύο κρίκοι είναι ισοτοπικοί η συνάρτηση να τους δίνει την ίδια εικόνα.



Σχήμα 3.1: (α)Κινήσεις Reidemeister.



Σχήμα 3.2: (β) Κινήσεις Reidemeister για πολυγωνικές καμπύλες.

Χρησιμοποιώντας τον τύπο για τον αριθμό περιέλιξης δύο κλειστών καμπύλων είναι πολύ εύκολο να δούμε ότι ο αριθμός αυτός δεν αλλάζει κάτω από τις προσανατολισμένες κινήσεις. Άρα για κλειστές προσανατολισμένες καμπύλες l_1 και l_2 ο αριθμός περιέλιξης $Lk(l_1, l_2)$ είναι μία αναλλοίωτη ιστοτοπίας, δηλαδή δεν μεταβάλλεται κάτω από ελαστικές κινήσεις των l_1, l_2 στον χώρο.

Αντιθέτως, ο αριθμός περιέλιξης προσανατολισμένων ανοικτών αλυσίδων δεν είναι αναλλοίωτος σε παραμορφώσεις των αλυσίδων. Σημειώνουμε ότι ο αριθμός περιέλιξης προσανατολισμένων ανοικτών αλυσίδων είναι ένας πραγματικός αριθμός όχι ακέραιος. Θα δείξουμε ότι αυτή η συνάρτηση είναι συνεχής ως προς τις συντεταγμένες των κορυφών των ανοικτών αλυσίδων, και άρα ολοκληρώσιμη στον χώρο των διαμορφώσεων (space of configurations). Ο χώρος των διαμορφώσεων είναι όλα τα δυνατά ζεύγη πολυγωνικών αλυσίδων τέτοια ώστε να μην έχουν τομές μεταξύ τους, ούτε αυτοτομές στο χώρο.

Ο χώρος των διαμορφώσεων μπορεί να διαφέρει για τα διάφορα είδη πολυγωνικών αλυσίδων όπως αυτές που παράγουν οι κανονικοί τυχαίοι περίπατοι, ή οι ομοιόμορφοι τυχαίοι περίπατοι σε περιορισμένο χώρο.

Εδώ θα μελετήσουμε την πιο γενική περίπτωση των διαμορφώσεων που μπορούν να κατασκευαστούν από δύο ακολουθίες γραμμικών τμημάτων από άκρο εις άκρο συνδεδεμένες ώστε να φτιάχνουν δύο εμφυτευμένες πολυγωνικές καμπύλες στον \mathbb{R}^3 . Θεωρούμε ότι το πλήθος των γραμμικών τμημάτων που αποτελούν τις πολυγωνικές καμπύλες είναι σταθερό ίσο με n για την κάθε μία. Βάζοντας τις συντεταγμένες κάθε κορυφής $v_i, w_i, 0 \leq i \leq n$ και των δύο πολυγωνικών αλυσίδων στη σειρά έχουμε ένα σημείο

$$(x_0, y_0, z_0, x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n, x'_0, y'_0, z'_0, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) \in \mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n}.$$

Έστω N το σύνολο που αντιστοιχεί σε πολυγωνικές καμπύλες με αυτοτομές ή σε ζεύγη πολυγωνικών καμπύλων που τέμνονται. Αυτό το σύνολο είναι μία ένωση $2\left(\frac{1}{2}n(n-3)\right) + n^2$ τμημάτων. Αυτό συμβαίνει διότι $\frac{1}{2}n(n-3)$ τμήματα αντιστοιχούν στις πολυγωνικές καμπύλες των οποίων δύο μή γειτονικές ακμές τέμνονται και n^2 τμήματα αντιστοιχούν στα ζεύγη πολυγωνικών καμπύλων των

οποίων δύο ακμές τέμνονται.

Για παράδειγμα, το υποσύνολο του N που αποτελείται από τα ζεύγη πολυγώνων για τα οποία οι ακμές $e_1 = v_i, v_{i+1}$ και $e_2 = w_j, w_{j+1}$ τέμνονται μπορούν να περιγραφούν σαν την συλλογή των ζευγών πολυγώνων για τα οποία

(i) οι κορυφές $v_i, v_{i+1}, w_j, w_{j+1}$ είναι συνεπίπεδες,

(ii) η γραμμή που ορίζεται από την v_i και την v_{i+1} διαχωρίζει την w_j από την w_{j+1} ,

(iii) η γραμμή που ορίζεται από την w_j και την w_{j+1} διαχωρίζει την v_i από την v_{i+1} .

Παρατηρούμε ότι αυτό το υποσύνολο αντιστοιχεί στο κλείσιμο του συνόλου λύσεων στον $\mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n}$ του συστήματος

$$\begin{aligned} (v_{i+1} - v_i) \times (w_j - v_i) \cdot (w_{j+1} - v_i) &= 0 \\ (v_{i+1} - v_i) \times (w_j - v_i) \cdot (v_{i+1} - v_i) \times (w_{j+1} - v_i) &< 0 \\ (w_{j+1} - w_j) \times (v_i - w_j) \cdot (w_{j+1} - w_j) \times (v_{i+1} - w_j) &< 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

Έτσι κάθε κομμάτι είναι μία υπερεπιφάνεια με σύνορο.

Έχουμε λοιπόν ότι ο χώρος των δυνατών διαμορφώσεων είναι ο $\Omega = \mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n} \setminus N$. Ο είναι χώρος μέτρου με σ-άλγεβρα την παραγόμενη από τα ανοικτά του Ω και μέτρο το μέτρο Lebesgue. Όπως δείξαμε παραπάνω $\mu(N) = 0$.

Θεώρημα 3.0.4. *Ο αριθμός περιέλιξης δύο προσανατολισμένων πολυγωνικών αλυσίδων n είναι συνεχής συνάρτηση στο $\Omega = \mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n} \setminus N$.*

Για να αποδείξουμε το Θεώρημα 3.0.7 θα χρειαστούμε το παρακάτω θεώρημα από την ανάλυση.

Θεώρημα 3.0.5. *Εάν η συνάρτηση $f(x, t)$ είναι συνεχής στο διάστημα $\Delta = J \times [a, b]$, τότε η συνάρτηση*

$$F(x) = \int_{[a,b]} f(x, t) dt \quad (3.2)$$

είναι συνεχής στο J .

Απόδειξη του Θεωρήματος 3.0.7. Έστω $X = (X_0, \dots, X_n), Y = (Y_0, \dots, Y_n)$ δύο πολυγωνικές αλυσίδες και $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ η παραμετρικοποίηση της X και Y αντίστοιχα.

Ο αριθμός περιέλιξής τους είναι

$$L(X, Y) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \quad (3.3)$$

όπου $l_i(t) = (t-1)X_{i-1} + tX_i$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X_{i-1}X_i$, $l_j(s) = (s-1)Y_{j-1} + sY_j$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $Y_{j-1}Y_j$, και $\dot{l}_i(t) = X_{i-1} + X_i, \dot{l}_j(s) = Y_{j-1} + Y_j$.

Αρκεί να δείξουμε ότι κάθε όρος στο παραπάνω άθροισμα είναι μία συνεχής συνάρτηση στο $\Omega_1 = (\mathbb{R}^3)^2 \times (\mathbb{R}^3)^2 \setminus N'$ όπου $N' \subset N$.

Έστω λοιπόν η παρακάτω συνάρτηση

$$l(e_i, e_j) = \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \quad (3.4)$$

που αντιστοιχεί στον αριθμό περιέλιξης των ακμών $e_i = X_{i-1}X_i$ και $e_j = Y_{j-1}Y_j$. Αυτή η συνάρτηση γράφεται :

$$l(e_i, e_j) = \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{\begin{vmatrix} A_1 & A_2 & A_3 \\ X_i^{(1)} - X_{i-1}^{(1)} & X_i^{(2)} - X_{i-1}^{(2)} & X_i^{(3)} - X_{i-1}^{(3)} \\ Y_j^{(1)} - Y_{j-1}^{(1)} & Y_j^{(2)} - Y_{j-1}^{(2)} & Y_j^{(3)} - Y_{j-1}^{(3)} \end{vmatrix}}{|tX_i + (1-t)X_{i-1} - sY_j - (1-s)Y_{j-1}|^3} dt ds \quad (3.5)$$

όπου $A_m = tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}, m = 1, 2, 3$.

Αναπτύσσοντας την ορίζουσα παίρνουμε

$$\sum_{1 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j)(tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}).$$

Τότε έχουμε

$$\begin{aligned}
& l(e_i, e_j) \\
&= \sum_{0 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) \\
& \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}}{|tX_k + (1-t)X_{k-1} - sY_j - (1-s)Y_{j-1}|^3} dt ds \\
&= \sum_{1 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) \\
& \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}}{(\sum_{1 \leq m \leq 3} (tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)})^2)^{\frac{3}{2}}} dt ds
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Έστω $f(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j, s, t) = \frac{tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}}{(\sum_{1 \leq m \leq 3} (tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)})^2)^{\frac{3}{2}}} dt ds$
και $F(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) = \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}}{(\sum_{1 \leq m \leq 3} (tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)})^2)^{\frac{3}{2}}} dt ds$.
Τότε $f \in C_1(\Omega_1 \times [0, 1] \times [0, 1])$, και άρα από το Θεώρημα 3.0.5 $f_1(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j, s) = \int_{[0,1]} f dt$ είναι συνεχής στο $\Omega_1 \times [0, 1]$. Εφαρμόζοντας πάλι το Θεώρημα 3.0.5 συμπεραίνουμε ότι και η $F(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j)$ συνεχής στο Ω_1 .

Άρα και η $L(X, Y)$ συνεχής ως άθροισμα συνεχών συναρτήσεων.

□

Ορισμός 3.0.6. Μία στοιχειώδης παραμόρφωση δύο πολυγωνικών αλυσίδων που ορίζονται από ένα σύνολο κορυφών $\{X_i | i = 0, \dots, n\}$ και $\{Y_j | j = 0, \dots, n\}$ είναι μία μονοπαραμετρική οικογένεια $(X(u), Y(u)) = \{(X_i(u), Y_j(u)) | i, j = 0, \dots, n\}$, $u_k \leq u \leq u_{k+1}$ από ζεύγη πολυγωνικών αλυσίδων τέτοια ώστε για κάποιο δείκτη k και κάποιο σημείο X'_k (ή Y'_k), $X_i(u) = X_i$ για κάθε u εάν $i \neq k$ (αντίστοιχα $Y_j(u) = Y_j$, $j \neq k$) και $X_k(u) = \frac{u_{k+1}-u}{u_{k+1}-u_k} X_k + \frac{u-u_k}{u_{k+1}-u_k} X'_k$ (αντίστοιχα $Y_k(u) = \frac{u_{k+1}-u}{u_{k+1}-u_k} Y_k + \frac{u-u_k}{u_{k+1}-u_k} Y'_k$) τέτοια ώστε $X(u)$ (ή $Y(u)$ αντίστοιχα) δεν έχει αυτοτομές, ούτε τέμνει την $Y(u)$ (την $X(u)$ αντίστοιχα) για καμία τιμή του u .

Κάθε συνεχής παραμόρφωση ενός ζεύγους πολυγωνικών αλυσίδων τέτοια ώστε να μην επιτρέπονται οι τομές και οι αυτοτομές των αλυσίδων, μπορεί να εκφραστεί σαν μία ακολουθία από στοιχειώδεις παραμορφώσεις της κάθε πολυγωνικής αλυσίδας.

Προφανώς, μία στοιχειώδης παραμόρφωση ενός πολυγώνου είναι μία ισοτοπία σύμφωνα με τον ορισμό.

Θα αποδείξουμε τώρα το παρακάτω:

Θεώρημα 3.0.7. *Ο αριθμός περιέλιξης δύο προσανατολισμένων πολυγωνικών αλυσίδων είναι ομοιόμορφα συνεχής συνάρτηση υπό στοιχειώδεις παραμορφώσεις των αλυσίδων.*

Απόδειξη. Έστω δύο πολυγωνικές αλυσίδες X, Y ορισμένες στον χώρο των επιτρεπτών διαμορφώσεων $\Omega = \mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n} \setminus N$. Ο χώρος αυτός είναι ένας μετρικός χώρος με μετρική την $\rho((X, Y), (X', Y')) = \max\{\max_{0 \leq i \leq n}\{X_i - X'_i\}, \max_{0 \leq j \leq n}\{Y_j - Y'_j\}\}$. Έστω μία στοιχειώδης παραμόρφωση τέτοια ώστε να μετακινείται η κορυφή X_k κατά μία απόσταση $\delta = \frac{\epsilon\alpha}{8n}$ όπου $\alpha = \max_{0 \leq j \leq n}\{X_k - Y_j\}$. Τότε για το νέο ζεύγος πολυγωνικών αλυσίδων X', Y' που προκύπτουν έχουμε $\rho((X, Y), (X', Y')) = \delta$.

Ο αριθμός περιέλιξής τους τότε είναι

$$L(X', Y') = \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}'_i(t), \dot{l}'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \quad (3.7)$$

όπου $l'_i(t)$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X'_i X'_{i+1}$ και $l'_j(s)$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $Y'_j Y'_{j+1}$.

Έτσι,

$$\begin{aligned} L(X', Y') &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}'_i(t), \dot{l}'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c_{ij} \text{Area of } Q(i', i+1', j', j+1') \end{aligned} \quad (3.8)$$

Όπου *Area of* $Q(i', i + 1', j', j + 1')$ είναι το εμβαδόν της στερεάς γωνίας που ορίζεται από τις ακμές $X'_i X'_{i+1}$ και $Y'_j Y'_{j+1}$. Τότε έχουμε

$$\begin{aligned}
|L(X, Y) - L(X', Y')| &= \left| \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c_{ij} \text{Area of } Q(i, i + 1, j, j + 1) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c'_{ij} \text{Area of } Q(i', i + 1', j', j + 1') \right| \\
&= \left| \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c_{ij} (\text{Area of } Q(i, i + 1, j, j + 1) \right. \\
&\quad \left. - c'_{ij} \text{Area of } Q(i', i + 1', j', j + 1') \right|
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Αφού $X'_i = X_i \forall i \neq k$ και $Y'_j = Y_j \forall j$, οι μόνες στερεές γωνίες που διαφέρουν είναι αυτές που αφορούν τις ακμές $X'_{k-1} X'_k, X_{k-1} X_k$ και $X'_k X'_{k+1}, X_k X_{k+1}$.

$$\begin{aligned}
|L(X, Y) - L(X', Y')| &= \frac{1}{4\pi} \left| \sum_{0 \leq j \leq n} c_{k-1, j} \text{Area of } Q(k - 1, k, j, j + 1) \right. \\
&\quad \left. - c'_{k-1, j} \text{Area of } Q(k - 1', k', j', j + 1') \right. \\
&\quad \left. + \sum_{0 \leq j \leq n} c_{k, j} \text{Area of } Q(k, k + 1, j, j + 1) \right. \\
&\quad \left. - c'_{k, j} \text{Area of } Q(k', k + 1', j', j + 1') \right|
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Για το ζεύγος πολυγωνικών αλυσίδων X', Y' η στερεά γωνία $Q(k', k + 1', j, j + 1)$ των ακμών $X_k X_{k+1}$ και $Y_j Y_{j+1}$ θα είναι

$$\begin{aligned}
Q(k', k + 1', j, j + 1) &= -2\pi + d(k', j, k + 1', j + 1) + d(k + 1', j, k', j + 1) \\
&\quad + d(k + 1', j + 1, k', j) + d(k', j + 1, k + 1', j)
\end{aligned} \tag{3.11}$$

όπου $d(i, j, k, l) = \eta$ διέδρη γωνία από το τρίγωνο $X_i X_k Y_j$ στο τρίγωνο $X_i Y_j Y_l$ στην ακμή $X_i Y_j$.

Έστω n_1, n_2, n_3, n_4 να είναι τα μοναδιαία διανύσματα κάθετα στα επίπεδα που αποτελούν το σύνορο της στερεάς γωνίας $Q(k, k+1, j, j+1)$ και έστω n'_1, n'_2, n'_3, n'_4 τα μοναδιαία κάθετα διανύσματα στα επίπεδα που αποτελούν το σύνορο της στερεάς γωνίας $Q(k', k'+1, j, j+1)$. Η διέδρη γωνία μεταξύ δύο εδρών του τετραέδρου είναι ίση με τη γωνία των κάθετων διανυσμάτων των εδρών αυτών. Έστω τώρα $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$ η γωνία μεταξύ των n_1, n'_1 , των n_2, n'_2 , των n_3, n'_3 και των n_4, n'_4 αντίστοιχα. Χωρίς βλάβη της γενικότητας ας υποθέσουμε ότι η μεγαλύτερη διαφορά διέδρων γωνιών μεταξύ των δύο τετραέδρων είναι αυτή που ορίζουν τα κάθετα διανύσματα n_1, n_2 , έστω d_{12} και n'_1, n'_2 έστω d'_{12} . Έστω ϕ_1 η μεγαλύτερη γωνία μεταξύ των κάθετων διανυσμάτων. Τότε η διαφορά των διέδρων γωνιών θα είναι $d_{12} - d'_{12} \leq 2\phi_1 \leq \frac{2\pi\delta}{\alpha}$.

Όταν το πρόσημο της διασταύρωσης των προβολών των δύο ακμών δεν αλλάζει μετά την στοιχειώδη παραμόρφωση, έχουμε ότι

$$|Q(k, k+1, j, j+1) - Q(k', k'+1, j, j+1)| < 4\frac{2\pi\delta}{\alpha} = \frac{8\pi\delta}{\alpha}.$$

Παρατηρούμε όμως ότι όταν το πρόσημο της διασταύρωσης έχει αλλάξει κατά την στοιχειώδη παραμόρφωση, η γωνία των κάθετων διανυσμάτων θα έχει αλλάξει κατά $\phi' = \pi + \phi$ και έτσι πάλι έχουμε

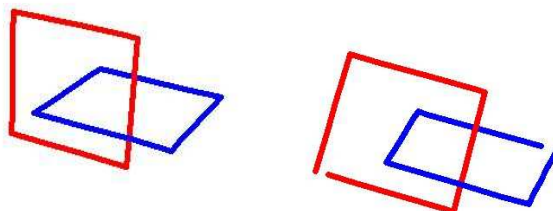
$$|Q(k, k+1, j, j+1) - Q(k', k'+1, j, j+1)| < 4\frac{\delta}{2\pi\alpha} = \frac{2\delta}{\pi\alpha}.$$

Δουλεύοντας με τον ίδιο τρόπο για κάθε στερεά γωνία έχουμε

$$|L(X, Y) - L(X', Y')| < \frac{1}{4\pi} 2n \frac{8\pi\delta}{\alpha} = \frac{8n\delta}{\alpha} = \epsilon. \quad (3.12)$$

□

Πόρισμα 3.0.8. Ο αριθμός περιέλιξης δύο προσανατολισμένων πολυγωνικών αλυσίδων $X = (X_0, X_1, \dots, X_n)$ και $Y = (Y_0, Y_1, \dots, Y_n)$ καθώς τα άκρα των X και Y έρχονται πιο κοντά τείνει στον αριθμό περιέλιξης των δύο κλειστών προσανατολισμένων πολυγώνων \bar{X}, \bar{Y} που προκύπτουν όταν τα X_0 και X_n , και Y_0 και Y_n συμπίπτουν.



Σχήμα 3.3: α) Τετράγωνα $\bar{X} = (X_0, X_1, X_2, X_3)$ και $\bar{Y} = (Y_0, Y_1, Y_2, Y_3)$ με αριθμό περιέλιξης $L(\bar{X}, \bar{Y}) = 1$ (β) Πολυγωνικές αλυσίδες $X = (X'_0, X'_1, X'_2, X'_3, X'_4)$ και $Y = (Y'_0, Y'_1, Y'_2, Y'_3, Y'_4)$. Για απόσταση των άκρων της X και Y αντίστοιχα κατά $\epsilon = 0.1$ ο αριθμός περιέλιξης είναι $L(X, Y) = 0.985497$

Για να κατανοήσουμε τα παραπάνω θα δώσουμε ένα παράδειγμα δύο κλειστών καμπύλων τις οποίες στη συνέχεια ανοίγουμε κατά $\epsilon = 0.1$.

Παράδειγμα 2 Ένα πολύ βοηθητικό παράδειγμα για τον υπολογισμό του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο προσανατολισμένων πολυγωνικών αλυσίδων είναι το παρακάτω :

Έστω $\bar{X} = (X_0, X_1, X_2, X_3)$ και $\bar{Y} = (Y_0, Y_1, Y_2, Y_3)$ δύο τετράγωνα με τον προσανατολισμό που επάγει η σειρά των κορυφών, δείτε Εικ. 3.3. Οι συντεταγμένες κάθε κορυφής είναι: $X_0 = (1, 0, -1), X_1 = (0, 0, -1), X_2 = (0, 0, 0), X_3 = (0, 0, 1)$ και $Y_0 = (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), Y_1 = (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), Y_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), Y_3 = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$. Ο αριθμός περιέλιξής τους είναι

$$L(\bar{X}, \bar{Y}) = 1 \quad (3.13)$$

Έστω $X = (X'_0, X'_1, X'_2, X'_3, X'_4)$ και $Y = (Y'_0, Y'_1, Y'_2, Y'_3, Y'_4)$ δύο προσανατολισμένες πολυγωνικές αλυσίδες των οποίων οι συντεταγμένες είναι: $X'_0 = (1, 0, -1), X'_1 = (0, 0, -1), X'_2 = (0, 0, 0), X'_3 = (0, 0, 1), X'_4 = (1 + \epsilon \sqrt{1 - \frac{\epsilon^2}{4}}, 0, -1 +$

$\frac{\epsilon^2}{2}$) και

$$Y'_0 = (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), Y'_1 = (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), Y'_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), Y'_3 = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}),$$

$Y'_4 = (-\frac{1}{2} - \epsilon\sqrt{1 - \frac{\epsilon^2}{4}}, -\frac{1}{2} + \frac{\epsilon^2}{2}, -\frac{1}{2})$. Ο αριθμός περιέλιξης των ανοικτών αλυσίδων X, Y τότε είναι

$$L(X, Y) = \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq 3} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}'_i(t), \dot{l}'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \quad (3.14)$$

όπου $l'_i(t)$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X'_i X'_{i+1}$ και $l'_j(s)$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $Y'_j Y'_{j+1}$.

Έτσι,

$$\begin{aligned} L(X, Y) &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq 3} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}'_i(t), \dot{l}'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq 3} c_{ij} \text{Area of } Q(i', i+1', j', j+1') \end{aligned} \quad (3.15)$$

Όπου *Area of* $Q(i', i+1', j', j+1')$ είναι το εμβαδόν της στερεάς γωνίας που ορίζεται από τις ακμές $X'_i X'_{i+1}$ και $Y'_j Y'_{j+1}$.

Η στερεά γωνία $Q(i, i+1, j, j+1)$ των ακμών $X_i X_{i+1}$ και $Y_j Y_{j+1}$ θα είναι

$$\begin{aligned} Q(i, i+1, j, j+1) &= -2\pi + d(i, j, i+1, j+1) + d(i+1, j, i, j+1) + d(i+1, j+1, i, j) \\ &\quad + d(i, j+1, i+1, j) \end{aligned} \quad (3.16)$$

όπου $d(i, j, k, l) =$ η διέδρη γωνία από το τρίγωνο $X_i X_k Y_j$ στο τρίγωνο $X_i Y_j Y_l$ στην ακμή $X_i Y_j$. Έστω

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{r_{i,j} \times r_{i,j+1}}{|r_{i,j} \times r_{i,j+1}|}, n_2 = \frac{r_{i,j+1} \times r_{i+1,j+1}}{|r_{i,j+1} \times r_{i+1,j+1}|}, n_3 = \frac{r_{i+1,j+1} \times r_{i+1,j}}{|r_{i+1,j+1} \times r_{i+1,j}|}, \\ n_4 &= \frac{r_{i+1,j} \times r_{i,j}}{|r_{i+1,j} \times r_{i,j}|} \end{aligned} \quad (3.17)$$

να είναι τα μοναδιαία διανύσματα κάθετα στα επίπεδα που αποτελούν το σύνορο της στερεάς γωνίας

$$Q(i, i + 1, j, j + 1).$$

Τότε, λαμβάνοντας υπ'οψην τον αμοιβαίο τους προσανατολισμό [37], έχουμε:

$$d(i, j, i + 1, j + 1) = \arccos(-n_1 n_4) = \frac{\pi}{2} + \arcsin(n_1 n_4),$$

$$d(i + 1, j, i, j + 1) = \arccos(-n_3 n_4) = \frac{\pi}{2} + \arcsin(n_3 n_4)$$

κ.τ.λ.

Αυτό συμβαίνει διότι το εσωτερικό γινόμενο $n_i n_j$ μας δίνει το συνιμήτονο της διέδρης γωνίας έστω ϕ των αντίστοιχων πλευρών του τετραέδρου, αλλά εμάς μας ενδιαφέρει η «εξωτερική» γωνία $\pi - \phi$ η οποία έχει συνιμήτονο $-n_i n_j$

Τότε

$$Q(i, i + 1, j, j + 1) = \arcsin(n_1 n_2) + \arcsin(n_2 n_3) + \arcsin(n_3 n_4) + \arcsin(n_4 n_1) \quad (3.18)$$

Δουλεύοντας με τον ίδιο τρόπο για κάθε στερεά γωνία και εφόσον οι αποστάσεις είναι όλες γνωστές για $\epsilon = 0.1$ έχουμε

$$L(X, Y) = 0.985497. \quad (3.19)$$

Ο αριθμός συστροφής δεν είναι αναλλοίωτη ιστοπίας ούτε για ανοικτές ούτε για κλειστές καμπύλες. Το ίδιο και ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων.

Τέλος, όμοια με τον αριθμό περιέλιξης, ο αριθμός αυτοπεριέλιξης $SL(l)$ είναι αναλλοίωτος υπό μία μή εκφυλισμένη ιστοπία (όπου μία μή εκφυλισμένη ιστοπία εννοούμε μία ιστοπία η οποία για κάθε σταθερό η καμπύλη έχει παντού μη μηδενική καμπυλότητα) όταν η l είναι κλειστή ενώ για ανοικτή ισχύουν όσα είπαμε πριν για τον αριθμό περιέλιξης, εφόσον αποδεικνύεται ότι $SL(l) = Lk(l_1, l_\epsilon)$.

Παρατήρηση 3.0.9. Σε αυτήν την περίπτωση μπορούμε να προχωρήσουμε ένα βήμα περισσότερο και να μιλήσουμε για κορδέλλες και ισοτοπία κορδέλλων αντί για κόμβους και ισοτοπία κόμβων. Αποδεικνύεται ότι αν η l είναι κλειστή καμπύλη ο $SL(l)$ είναι αναλλοίωτη ισοτοπίας κορδέλλων.

Πράγματι, έστω μία κορδέλλα $R(\text{ribbon})$ τότε $Lk(R)$ είναι ο αριθμός αυτοπεριέλιξης της κορδέλλας R (του κεντρικού της άξονα). Τότε θέτοντας $Tw(R)$ να μετρά το κατά πόσο η κορδέλλα R περιστρέφεται γύρω από τον άξονά της και $Wr(R)$ να μετρά το κατά πόσο η κορδέλλα R είναι στριφογυρισμένη στον χώρο παίρνουμε την εξίσωση

$$Lk(R) = Tw(R) + Wr(R) \quad (3.20)$$

η οποία αποτελεί την θεμελιώδη εξίσωση που διέπει ένα μόριο DNA.

Κεφάλαιο 4

Ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων κανονικών τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων.

Θα παρουσιάσουμε κάποια από τα αποτελέσματα των Y. Diao, A. Dobay, R. B. Kushner, K. Millett και A. Stasiak [17] που αφορούν την ασυμπτωτική τάση του μέσου αριθμού διασταυρώσεων ενός πολυγώνου ή μίας πολυγωνικής αλυσίδας, και των Y. Diao, A. Dobay και A. Stasiak [18] για την ασυμπτωτική τάση του αριθμού διασταυρώσεων δύο πολυγώνων και δύο πολυγωνικών αλυσίδων τα οποία αποτέλεσαν θεμέλια για την θεωρητική μας μελέτη.

4.1 Μέσος αριθμός διασταυρώσεων ενός τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου

Ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων (average crossing number - ACN) της ιδανικής αναπαράστασης ενός πολυμερούς χρησιμοποιείται ευρέως σαν ένα γεωμετρικό μέτρο διαπλοκής, καθώς αναφέρεται στον αριθμό των διασταυρώσεων που μπορούν να γίνουν ορατές κατά την παρατήρηση μίας μη διαταρασόμενης προβολής ενός δοθέντος πολυμερούς. [31]. Θεωρείται ότι είναι ένα καλό μέγεθος μέτρησης της πολυπλοκότητας των διαπλοκών μίας αλυσίδας [38],[39],[40].

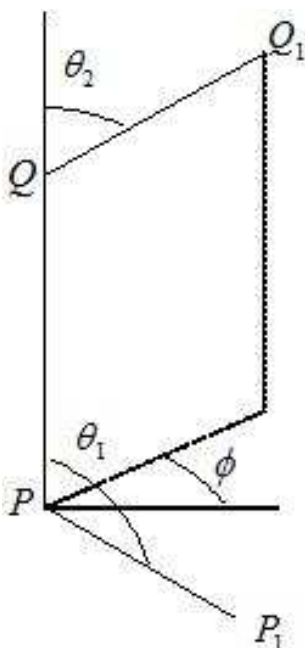
Ενδιαφερόμαστε ιδιαίτερα για χαρακτηρισμούς της αυξητικής τάσης του μέσου αριθμού διασταυρώσεων, ως συνάρτηση του αριθμού των ακμών, πάνω από όλο το στατιστικό σύνολο των ιδανικών τυχαίων περιπάτων με ένα δοθέν αριθμό ακμών [17], ο ορισμός του οποίου δίνεται στην παράγραφο 2.3 ως

$$\begin{aligned} \chi_n &= \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{|(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), |\gamma(t) - \gamma(s)|)|}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{|(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), |l_i(t) - l_j(s)|)|}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \end{aligned} \quad (4.1)$$

όπου $l_i(t)$ είναι η παραμετροποίηση της ακμής $X_{i-1}X_i$ και $l_j(s)$ είναι η παραμετροποίηση της ακμής $X_{j-1}X_j$.

Τα Θεωρήματα που ακολουθούν παρέχουν μία εκτίμηση της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς της μέσης τιμής του μέσου αριθμού διασταυρώσεων, $\langle \text{ACN} \rangle$, ως προς το μήκος των διαφορετικών τύπων τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων πάνω από τον χώρο διακορφώσεων, και είναι αναλυτικά αποδεδειγμένα και αριθμητικά επιβεβαιωμένα από αριθμητικές προσομοιώσεις στο [17].

Έστω $U = (u, v, w)$ ένα τριδιάστατο τυχαίο διάνυσμα ομοιόμορφα κατανομημένο στην μοναδιαία σφαίρα S^2 , δηλαδή η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του U είναι $\phi(U) = \frac{1}{4\pi}$ εάν $|U| = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2} = 1$ και 0 αλλιώς.



Σχήμα 4.1: Η περίπτωση δύο τυχαίων ακμών PP_1 και QQ_1

Έστω \vec{v}_1 και \vec{v}_2 οποιαδήποτε δύο διανύσματα με κοινή αρχή που είναι κάθετα το ένα στο άλλο. Έστω Σ ένα επίπεδο κάθετο στο \vec{v}_1 που περιέχει το \vec{v}_2 . Έστω θ η γωνία μεταξύ του \vec{v}_1 και του U (σαν μοναδιαίο διάνυσμα με αρχή την αρχή των αξόνων), και έστω ϕ η γωνία μεταξύ του \vec{v}_2 και της προβολής του U πάνω στο Σ . Τα μέτρα των θ και ϕ είναι και τα δύο μεταξύ του 0 και π . Τότε μπορούμε να δείξουμε ότι οι θ και ϕ είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές. Επιπλέον, η ϕ είναι ομοιόμορφα κατανομημένη πάνω στο $[0, \pi]$, δηλαδή η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της ϕ είναι $\frac{1}{\pi}$ και η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του θ είναι $g(\theta) = 2\pi \sin \theta \phi(U) = \frac{1}{2} \sin \theta$. Συνεπάγεται ότι η μέση τιμή του $\sin \phi$ είναι $E(\sin \phi) = \int_{[0, \pi]} \sin \phi f(\phi) d\phi = \int_{[0, \pi]} \sin \phi \frac{1}{\pi} d\phi = \frac{2}{\pi}$ και η μέση τιμή του $\sin \theta$ είναι $E(\sin \theta) = \int_{[0, \pi]} \sin \theta \frac{1}{2} \sin \theta d\theta = \frac{1}{2} \int_{[0, \pi]} \sin^2 \theta d\theta = \frac{1}{2} \int_{[0, \pi]} \frac{1 - \cos^2 \theta}{2} d\theta = \frac{\pi}{4}$.

Υποθέτουμε ότι U_1, U_2, \dots, U_n είναι n ανεξάρτητα τυχαία διανύσματα ομοιόμορφα κατανομημένα στην S^2 . Ένας κανονικός τυχαίος περίπατος n βημάτων, που συμβολίζεται EW_n , ορίζεται σαν μία ακολουθία σημείων στον τριδιάστα-

το χώρο \mathbb{R}^3 : $X_0 = 0, X_k = U_1 + U_2 + \dots + U_k, k = 1, 2, \dots, n$. Κάθε X_k ονομάζεται κορυφή του EW_n και το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει τα X_k και X_{k+1} ονομάζεται ακμή του EW_n (η οποία έχει μήκος μηδέν). Εάν η τελευταία κορυφή X_n του EW_n είναι σταθερή, τότε έχουμε έναν τυχαίο περίπατο υπό όρους $EW_n|X_n$. Συγκεκριμένα, ο EW_n γίνεται πολύγωνο αν $X_n = 0$. Σε αυτήν την περίπτωση, ονομάζεται ένα κανονικό τυχαίο πολύγωνο και συμβολίζεται EP_n . Παρατηρούμε ότι η από κοινού συνάρτηση κατανομή πιθανότητας $f(X_1, X_2, \dots, X_n)$ των κορυφών ενός EW_n είναι απλά

$$f(X_1, X_2, \dots, X_n) = \phi(U_1)\phi(U_2)\cdots\phi(U_n) = \phi(X_1)\phi(X_2 - X_1)\cdots\phi(X_n - X_{n-1}).$$

Έστω X_k η k -στή κορυφή ενός EW_n ($n \geq k > 1$). Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητάς του ορίζεται ως

$$f_k(X_k) = \int \int \cdots \int (X_1, X_2, \dots, X_k) s_{X_1} dX_2 \cdots dX_{k-1} \\ \int \int \cdots \int \phi(X_1)\phi(X_2 - X_1)\cdots\phi(X_k - X_{k-1}) s_{X_1} dX_2 \cdots dX_{k-1} \quad (4.2)$$

και έχει την κλειστή μορφή $f_k(X_k) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_{[0, \infty)} x \sin rx \left(\frac{\sin x}{x}\right)^k$, [50]. Είναι εύκολο να δει κανείς ότι η $f_k(X_k)$ είναι προσεγγιστικά κανονική για μεγάλες τιμές του k . Το παρακάτω λήμμα δίνει μία αρκετά ακριβή προσέγγιση της $f_k(X_k)$. Η απόδειξή του είναι στο

Λήμμα 4.1.1. Για $k \geq 10$, έχουμε

$$|f_k(X_k) - \left(\sqrt{\frac{3}{2\pi k}}\right)^3 \exp\left(-\frac{3|X_k|^2}{2k}\right)| < \frac{0.5}{k^{\frac{5}{2}}}. \quad (4.3)$$

Στην περίπτωση κανονικών τυχαίων πολυγώνων, συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας μίας κορυφής εξακολουθεί να είναι προσεγγιστικά Γκαουσιανή, αλλά αυτός ο υπολογισμός είναι κάπως πιο δύσκολος. Έχουμε το παρακάτω λήμμα.

Λήμμα 4.1.2. Έστω X_k η k -οστή κορυφή ενός EP_n και έστω h_k η κατανομή πυκνότητας πιθανότητάς της. Τότε

$$h_k(X_k) = \left(\sqrt{\frac{3}{2\pi\sigma_{nk}^2}}\right)^3 \exp\left(-\frac{3|X_k|^2}{2\sigma_{nk}^2}\right) + O\left(\frac{1}{k^{5/2}} + \frac{1}{(n-k)^{5/2}}\right), \quad (4.4)$$

όπου $\sigma_{nk}^2 = \frac{k(n-k)}{n}$.

Απόδειξη. Πρώτα, η από κοινού πυκνότητα πιθανότητας των κορυφών του EP_n είναι της μορφής

$$g(X_1, X_2, \dots, X_{n-1}) = \frac{1}{f_n(X_n)} \phi(X_1)\phi(X_2 - X_1) \cdots \phi(X_n - X_{n-1}) \quad (4.5)$$

με $X_n = X_0 = 0$, αφού σύμφωνα με τον τύπο της δεσμευμένης πιθανότητας $f(x|y) = \frac{f(x,y)}{f(y)}$ Ολοκληρώνουμε το παραπάνω ως προς X_1, X_2, \dots, X_{n-1} εκτός από το X_k , παίρνουμε

$$\begin{aligned} h(X_k) &= \int \cdots \int \frac{1}{f_n(X_n)} \phi(X_1)\phi(X_2 - X_1) \cdots \phi(X_n - X_{n-1}) \\ &\quad dX_1 \cdots dX_{k-1} dX_{k+1} \cdots dX_{n-1} \\ &= \frac{1}{f_n(X_n)} \int \cdots \int \left(\int \cdots \int \phi(X_1)\phi(X_2 - X_1) \cdots \phi(X_k - X_{k-1}) \right. \\ &\quad \left. dX_1 \cdots dX_{k-1} \right) \phi(X_{k+1} - X_k) \cdots \phi(X_n - X_{n-1}) dX_{k+1} \cdots dX_{n-1} \\ &= \frac{1}{f_n(X_n)} \int \cdots \int f_k(X_k) \phi(X_{k+1} - X_k) \cdots \phi(X_n - X_{n-1}) dX_{k+1} \cdots dX_{n-1} \\ &= \frac{1}{f_n(X_n)} \cdot f_k(X_k) \int \cdots \int \phi(X_{k+1} - X_k) \cdots \phi(X_n - X_{n-1}) dX_{k+1} \cdots dX_{n-1} \\ &= \frac{1}{f_n(0)} \cdot f_k(X_k) \cdot f_{n-k}(X_k). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Το αποτέλεσμα επάγεται εφαρμόζοντας τον τύπο του Λήμματος 4.1.1. \square

Παρατήρηση 4.1.3. Παρατηρούμε ότι λόγω συμμετρίας, η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f_k(X_k)$ και $h_k(X_k)$ της X_k (για κανονικούς τυχαίους περιπάτους και κανονικά τυχαία πολύγωνα αντίστοιχα) εξαρτώνται μόνο από το $|X_k|$ άρα μπορούν να γραφτούν σαν $f_k(|X_k|)$ και $h_k(|X_k|)$. Επιπλέον, εάν θέσουμε $\rho = |X_k|$ (το οποίο είναι επίσης μία τυχαία μεταβλητή), τότε η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του ρ είναι $4\pi\rho^2 f_k(\rho)$ για τους κανονικούς τυχαίους περιπάτους και $4\pi\rho^2 h_k(\rho)$ για τα κανονικά τυχαία πολύγωνα. Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας παίρνει μέγιστη τιμή για $\rho = O(\sqrt{n})$. Επάγεται ότι η μέση διάμετρος ενός EW_n ή ενός EP_n είναι της τάξης \sqrt{n} .

Έστω X_{k+1} και X_{k+2} δύο διαδοχικές κορυφές ενός κανονικού τυχαίου πολυγώνου EP_n , τότε η από κοινού συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $h(X_1, X_{k+1}, X_{k+2})$ των X_1, X_{k+1} και X_{k+2} ορίζεται ως

$$\int \dots \int \frac{\phi(X_1)\phi(X_2 - X_1) \cdots \phi(X_n - X_{n-1})}{f_n(O)} \widehat{dX_1} \widehat{dX_{k+1}} \widehat{dX_{k+2}} \quad (4.7)$$

όπου το ολοκλήρωμα είναι πάνω από όλες τις μεταβλητές εκτός των X_1, X_{k+1} και X_{k+2} . Το παρακάτω Λήμμα αποδεικνύεται με τρόπο παρόμοιο με αυτόν του Λήμματος

Λήμμα 4.1.4. Έστω X_1, X_{k+1} και X_{k+2} η πρώτη, $(k+1)$ -στή και $(k+2)$ -στή κορυφή ενός EP_n . Τότε η από κοινού συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $h_k(X_1, X_{k+1}, X_{k+2})$ μπορεί να προσεγγιστεί από

$$\phi(X_1)\phi(X_{k+2} - X_{k+1}) \left(\frac{3}{2\pi\sigma_{nk}^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{3|X_{k+1}|^2}{2\sigma_{nk}^2}\right), \quad (4.8)$$

όπου $\sigma_{nk}^2 = \frac{k(n-k)}{n}$ και ο όρος σφάλματος είναι το πολύ της τάξης $O\left(\frac{1}{k^{5/2}} + \frac{1}{(n-k)^{5/2}}\right)$.

Για την ασυμπτωτική συμπεριφορά του $\langle ACN \rangle$ ενός τυχαίου περιπάτου έχουμε το παρακάτω:

Θεώρημα 4.1.5. Έστω χ_n ο ACN ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου n βημάτων. Τότε η μέση τιμή του ACN πάνω από όλο το στατιστικό σύνολο των κανονικών τυχαίων περιπάτων n βημάτων είναι

$$E(\chi_n) = \frac{3}{16}n \ln n + O(n), \quad (4.9)$$

όπου ο συμβολισμός $O(x)$ χρησιμοποιείται για έναν όρο μεταξύ $-M|x|$ και $M|x|$ για κάποια θετική σταθερά M που είναι ανεξάρτητη της μεταβλητής x .

Για την απόδειξη του παραπάνω Θεωρήματος θα χρειαστούμε το Λήμμα 4.1.6.

Θεωρούμε τα σημεία P, Q στον \mathbb{R}^3 τέτοια ώστε $r = |P - Q| \geq 4$. Έστω P_1 και Q_1 δύο τυχαία σημεία στον \mathbb{R}^3 τέτοια ώστε $U_1 = P_1 - P$ και $U_2 = Q_1 - Q$ είναι ομοιόμορφα κατανομημένα στην μοναδιαία σφαίρα S^2 , Σχήμα 4.1.

Λήμμα 4.1.6. Έστω $P, Q, P - 1$ και Q_1 ορισμένα όπως παραπάνω και έστω $\alpha(l_1, l_2)$ ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ των $l_1 = PP_1$ και $l_2 = QQ_1$, τότε έχουμε

$$E(\alpha(l_1, l_2)) = \frac{1}{16r^2} + O\left(\frac{1}{r^3}\right). \quad (4.10)$$

Απόδειξη. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, ας υποθέσουμε ότι $P = O$ και ότι το Q είναι στον θετικό z -άξονα. Έστω θ_1 η γωνία μεταξύ του $U_1 = \overrightarrow{PP_1}$ και του z -άξονα και θ_2 η γωνία μεταξύ του $U_2 = \overrightarrow{QQ_1}$ και του z -άξονα. Επιπλέον, έστω ϕ η γωνία μεταξύ των προβολών των U_1 και U_2 στο xy -επίπεδο. Για σταθερό P_1 και Q_1 , ο μέσος αριθμός αριθμού διασταύρωσης $\alpha(l_1, l_2)$ μεταξύ των ακμών και δίνεται από το

$$\frac{1}{2\pi} \int_{l_1} \int_{l_2} \frac{|(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))|}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds \quad (4.11)$$

όπου γ_1 και γ_2 είναι οι παραμετρικοποιήσεις μήκους τόξου των l_1 και l_2 , και $(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))$ είναι το μεικτό γινόμενο των $\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s)$ και $\gamma_1(t) - \gamma_2(s)$.

Μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned}\gamma_1(t) &= tU_1, \quad 0 \leq t \leq 1 \\ \gamma_2(s) &= \overrightarrow{OQ} + sU_2, \quad 0 \leq s \leq 1.\end{aligned}$$

Με έναν απλό υπολογισμό, έχουμε

$$\begin{aligned}& \int_{l_1} \int_{l_2} |(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))| dt ds \\ &= \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} |(U_1, U_2, -\overrightarrow{OQ})| dt ds \\ &= \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} |(U_1, U_2, \overrightarrow{OQ})| dt ds \\ &= |(U_1, U_2, \overrightarrow{OQ})| = r \sin \phi \sin \theta_1 \sin \theta_2.\end{aligned}\tag{4.12}$$

Αφού $||\gamma_1(t) - \gamma_2(s)| - r| \leq 2$ και $r \geq 4$, έχουμε

$$r - 2 \leq |\gamma_1(t) - \gamma_2(s)| \leq r + 2 \Rightarrow \frac{1}{(r+2)^3} \leq \frac{1}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} \leq \frac{1}{(r-2)^3}\tag{4.13}$$

όμως για $r \geq 4$, $\exists M \in \mathbb{R}$ τέτοιο ώστε $\frac{1}{r+2} \leq \frac{1}{r^3} + M\frac{1}{r^4}$ και $\frac{1}{r-2} \geq \frac{1}{r^3} - M\frac{1}{r^4}$,
άρα

$$\frac{1}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} = \frac{1}{r^3} + O\left(\frac{1}{r^4}\right).\tag{4.14}$$

Συνοπάγεται ότι

$$\alpha(l_1, l_2) = \frac{1}{2\pi r^2} \sin \phi \sin \theta_1 \sin \theta_2 + O\left(\frac{1}{r^3}\right)\tag{4.15}$$

και

$$\begin{aligned}E(\alpha(l_1, l_2)) &= \int \int \alpha(l_1, l_2) \phi(U_1) \phi(U_2) dU_1 dU_2 \\ &= \frac{1}{8\pi^2 r^2} \int_{[0,\pi]} \int_{[0,\pi]} \int_{[0,\pi]} \sin \phi \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 d\theta_1 d\theta_2 + O\left(\frac{1}{r^3}\right) \\ &= \frac{1}{16r^2} + O\left(\frac{1}{r^3}\right)\end{aligned}\tag{4.16}$$

αφού η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του ϕ είναι $\frac{1}{\pi}$, η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του θ_1 είναι $\frac{1}{2} \sin \theta_1$ και η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του θ_2 είναι $\frac{1}{2} \sin \theta_2$. \square

Είμαστε έτοιμοι να αποδείξουμε το αρχικό Θεώρημα.

Απόδειξη του Θεωρήματος 4.1.5. Έστω l_k το k -στό τμήμα ενός τυχαίου περιπάτου n βημάτων, δηλαδή, $l_k = \overline{X_{k-1}X_k}$ ($1 \leq k \leq n$). Έστω $\alpha(l_i, l_j)$ ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ των l_i και l_j , τότε έχουμε

$$\chi_n = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \alpha(l_i, l_j), \quad (4.17)$$

και

$$E(\chi_n) = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} E(\alpha(l_i, l_j)) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} E(\alpha(l_i, l_j)). \quad (4.18)$$

Λόγω συμμετρίας, $E(\alpha(l_{i_1}, l_{j_1})) = E(\alpha(l_{i_2}, l_{j_2}))$ όποτε $|j_1 - i_1| = |j_2 - i_2|$. Συνεπάγεται ότι

$$E(\chi_n) = \sum_{3 \leq j \leq n} (n - j + 1) E(\alpha(l_1, l_j)), \quad (4.19)$$

όπου το j ξεκινά στο 3 αφού $\alpha(l_1, l_2) = 0$ αφού $n - (j - 1)$ το πλήθος ζεύγη ακμών απέχουν κατά $j - 1$ βήματα. Θέτοντας $r_j = |X_{j-1} - X_1|$, $P = X_1$, $P_1 = 0$, $Q = X_{j-1}$ και $Q_1 = X_j$, παίρνουμε

$$E(\alpha(l_1, l_j) | r_j) = \frac{1}{16r_j^2} + O\left(\frac{1}{r_j^3}\right) \quad (4.20)$$

για κάθε σταθερό $r_j \geq 4$ από το Λήμμα 4.1.6. Αφού το r_j είναι μία τυχαία μεταβλητή που εξαρτάται μόνο από το $X_{j-1} - X_1$, και αφού το $X_{j-1} - X_1$ έχει την ίδια συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας με το X_{j-2} , επάγεται ότι

$$\begin{aligned}
E(\alpha(l_1, l_j)) &= \int E(\alpha(l_1, l_j)|r_j) f_{j-2}(|X_{j-1} - X_1|) d(X_{j-1} - X_1) \\
&= \int E(\alpha(l_1, l_j)|r_j) 4\pi r_j^2 f_{j-2}(r_j) dr_j \\
&= \int_{r_j < 4} E(\alpha(l_1, l_j)|r_j) 4\pi r_j^2 f_{j-2}(r_j) dr_j + \int_{r_j \geq 4} E(\alpha(l_1, l_j)|r_j) 4\pi r_j^2 f_{j-2}(r_j) dr_j
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Όπου $4\pi r_j^2$ είναι το εμβαδόν της σφαίρας ακτίνας r_j με κέντρο την κορυφή X_1 πάνω στην οποία μπορεί να βρίσκεται η κορυφή X_{j-1} που απέχει απόσταση r_j από την κορυφή X_1 .

Αφού $\alpha(l_1, l_j)$ είναι ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ δύο ευθύγραμμων ακμών, είναι το πολύ 1. Αν $j \geq 12$, τότε από το Λήμμα 4.1.2.

$$\begin{aligned}
&\int_{r_j < 4} E(\alpha(l_1, l_j)|r_j) 4\pi r_j^2 f_{j-2}(r_j) dr_j \\
&\leq \int_{r_j < 4} 4\pi r_j^2 f_{j-2}(r_j) dr_j \\
&\leq 4\pi \int_{[0,4]} \left(\left(\frac{3}{2\pi(j-2)} \right)^{\frac{3}{2}} r_j^2 \exp\left(-\frac{3r_j^2}{2(j-2)}\right) + \frac{r_j^2}{2(j-2)^{\frac{5}{2}}} \right) dr_j \\
&= O\left(\frac{1}{j^{\frac{3}{2}}}\right).
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Άπό την άλλη,

$$\begin{aligned}
&\int_{r_j \geq 4} E(\alpha(l_1, l_j)|r_j) 4\pi r_j^2 f_{j-2}(r_j) dr_j \\
&= \frac{\pi}{4} \int_{[4, j-2]} \left(1 + O\left(\frac{1}{r_j}\right)\right) \left(\frac{3}{2\pi(j-2)}\right) \exp\left(-\frac{3r_j^2}{2(j-2)}\right) dr_j \\
&+ \frac{\pi}{4} \int_{[4, j-2]} \left(1 + O\left(\frac{1}{r_j}\right)\right) \left(\frac{1}{2(j-2)^{\frac{5}{2}}}\right) dr_j \\
&= \frac{3}{16j} + O\left(\frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}\right).
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Σημειώνουμε ότι για τον υπολογισμό χρησιμοποιούμε την έκφραση

$$\exp\left(-\frac{3r_j^2}{2(j-2)}\right) = \sum_{0 \leq n \leq \infty} \left(-\frac{3r_j^2}{2(j-2)}\right)^n \frac{1}{n!}.$$

Συνδυάζοντας τα παραπάνω αποτελέσματα, παίρνουμε

$$E(\alpha(l_1, l_j)) = \frac{3}{16j} + O\left(\frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}\right). \quad (4.24)$$

$$E(\chi_n) = \frac{3}{16}n \sum_{3 \leq j \leq n} \frac{1}{j} - \frac{3}{16}(n-3) + nO\left(\sum_{3 \leq j \leq n} \frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}\right) \quad (4.25)$$

Το αποτέλεσμα ακολουθεί αφού τα $\sum_{3 \leq j \leq n} \frac{1}{j} - \ln n$ και $\sum_{3 \leq j \leq n} \frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}$ συγκλίνουν και τα δύο.

□

Παρατήρηση 4.1.7. Οι αριθμητικές προσομοιώσεις [21] δείχνουν μία συμπεριφορά της μορφής $n \ln n + cn$ επίσης για αλυσίδες με αποκλειόμενο όγκο.

Για την ασυμπτωτική συμπεριφορά του $\langle ACN \rangle$ ενός τυχαίου πολυγώνου έχουμε το παρακάτω:

Θεώρημα 4.1.8. Έστω χ'_n να είναι ο ACN ενός κανονικού τυχαίου πολυγώνου n βημάτων τότε η μέση τιμή του ACN πάνω από όλο το στατιστικό σύνολο κανονικών τυχαίων πολυγώνων n βημάτων είναι

$$E(\chi'_n) = \frac{3}{16}n \ln n + O(n). \quad (4.26)$$

Απόδειξη. Αν και το αποτέλεσμα του Θεωρήματος 4.1.8 είναι παρόμοιο με αυτό του Θεωρήματος 4.1.5, η απόδειξή του απαιτεί έναν πιο ειδικό χειρισμό αφού τα κανονικά τυχαία πολύγωνα δεν έχουν πια την ιδιότητα της μή περιθώριας Μαρκοβιανής αλυσίδας. Έστω χ'_n ο ACN ενός κανονικού τυχαίου πολυγώνου n τυχαίων βημάτων. Όπως και στην απόδειξη του Θεωρήματος 4.1.5, έστω l_k

το k -στό τμήμα του πολυγώνου, δηλαδή $l_k = \overline{X_{k-1}X_k}$ ($1 \leq k \leq n$). Έστω $\alpha(l_i, l_j)$ ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ των l_i και l_j , τότε έχουμε

$$\chi'_n = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \alpha(l_i, l_j), \quad (4.27)$$

και

$$E(\chi'_n) = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} E(\alpha(l_i, l_j)). \quad (4.28)$$

Στην περίπτωση ενός τυχαίου περιπάτου με n βήματα, έχουμε $E(\alpha(l_{i_2}, l_{j_1})) = E(\alpha(l_{i_2}, l_{j_2}))$ όποτε $|j_1 - i_1| = |j_2 - i_2|$, όπου τα l_{i_1}, l_{j_1} μπορεί να ανήκουν σε κάποιο τυχαίο περίπατο με n βήματα και τα l_{i_2}, l_{j_2} μπορεί να ανήκουν σε κάποιο τυχαίο περίπατο με m βήματα τέτοιο ώστε $n \neq m$. Αυτό δεν ισχύει για ένα κανονικό τυχαίο πολύγωνο n ακμών. Ωστόσο, αν $l_{i_1}, l_{j_1}, l_{i_2}$ και l_{j_2} είναι τμήματα ενός κανονικού τυχαίου πολυγώνου με n τμήματα, τότε εξακολουθούμε να έχουμε $E(\alpha(l_{i_2}, l_{j_1})) = E(\alpha(l_{i_2}, l_{j_2}))$ όποτε $|j_1 - i_1| = |j_2 - i_2|$ ή $|j_1 - i_1| = n - |j_2 - i_2|$ λόγω συμμετρίας. Επάγεται ότι

$$E(\chi'_n) = n \sum_{3 \leq j \leq (n+1)/2} E(\alpha(l_1, l_j)). \quad (4.29)$$

Ξανά το j ξεκινά στο 3 στον παραπάνω τύπο αφού το $\alpha(l_1, l_j)$ είναι πάντα 0. Έστω $r_j = |X_{j-1} - X_1|$. Αφού το $\alpha(l_1, l_j)$ εξαρτάται μόνο από τα X_1, X_{j-1} και το X_j , από τα Λήμματα 4.1.4 και 4.1.6 ,έχουμε

$$\begin{aligned}
E(\alpha(l_1, l_j)) &= \int \int \int \alpha(l_1, l_j) h_{j-2}(X_1, X_{j-1}, X_j) dX_1 dX_{j-1} dX_j \\
&= \int \int \alpha(l_1, l_j) \phi(X_1) \phi(X_j - X_{j-1}) dX_1 dX_j \\
&\int \left(\left(\sqrt{\frac{3}{2\pi\sigma_{n(j-2)}^2}} \right)^3 \exp\left(-\frac{3|X_{j-1}|^2}{2\sigma_{n(j-2)}^2}\right) + O\left(\frac{1}{j^{5/2}}\right) \right) dX_{j-1} \\
&= \int \int \alpha(l_1, l_j) \phi(U_1) \phi(U_2) dU_1 dU_2 \\
&\int_{r_j < 4} \left(\left(\frac{3}{2\pi\sigma_{n(j-2)}^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{3|X_{j-1}|^2}{2\sigma_{n(j-2)}^2}\right) + O\left(\frac{1}{j^{5/2}}\right) \right) dX_{j-1} \\
&+ \int \int \alpha(l_1, l_j) \phi(U_1) \phi(U_2) dU_1 dU_2 \\
&\int_{r_j \geq 4} \left(\left(\frac{3}{2\pi\sigma_{n(j-2)}^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{3|X_{j-1}|^2}{2\sigma_{n(j-2)}^2}\right) + O\left(\frac{1}{j^{5/2}}\right) \right) dX_{j-1} \\
&= O\left(\frac{1}{j^{\frac{3}{2}}}\right) + \frac{\pi}{4} \int_{[4, j-2]} \left(1 + O\left(\frac{1}{r_j}\right)\right) \cdot \left(\frac{3}{2\pi\sigma_{n(j-2)}^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{3r_j^2}{2\sigma_{n(j-2)}^2}\right) dr_j \\
&= \frac{3}{16\sigma_{n(j-2)}^2} + O\left(\frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}\right) = \frac{3}{16} \left(\frac{1}{j-2} + \frac{1}{n-j+2}\right) + O\left(\frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}\right) \\
&= \frac{3}{16j} + O\left(\frac{1}{n}\right) + O\left(\frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}\right),
\end{aligned} \tag{4.30}$$

όπου $U_1 = X_1$ και $U_2 = X_j - X_{j-1}$. Παίρνουμε το αποτέλεσμα, αφού τα $\sum_{3 \leq j \leq n/2} \frac{1}{j} - \ln n$ και $\sum_{3 \leq j \leq n/2} \frac{\ln j}{j^{\frac{3}{2}}}$ συγκλίνουν και τα δύο, το αποτέλεσμα ακολουθεί. □

Μελετώντας τα παραπάνω αποτελέσματα, βγάζουμε ενδιαφέροντα συμπεράσματα [17]:

Ένα πολύ ενδιαφέρον αποτέλεσμα έρχεται από την μελέτη της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς του $\langle \text{ACN} \rangle$ ως προς τον αριθμό των τμημάτων n για διαφορετικούς τύπους κόμβων K , $\langle \text{ACN}(K) \rangle$. Η τομές του $\langle \text{ACN}(K) \rangle$ με το

$\langle \text{ACN} \rangle$ όλων των τυχαίων πολυγώνων ορίζουν το επονομαζόμενο *μήκος ισορροπίας* ενός δοθέντος τύπου κόμβου K , δηλ. το μήκος στο οποίο ένα σύνολο κόμβων ενός δοθέντος τύπου μετά από κόψιμο και ξανά κόλλημα δεν θα έχουν την τάση να ελαττώσουν ή να αυξήσουν το $\langle \text{ACN} \rangle$ τους διαμορφώνοντας πιο απλούς ή πιο πολύπλοκους κόμβους.

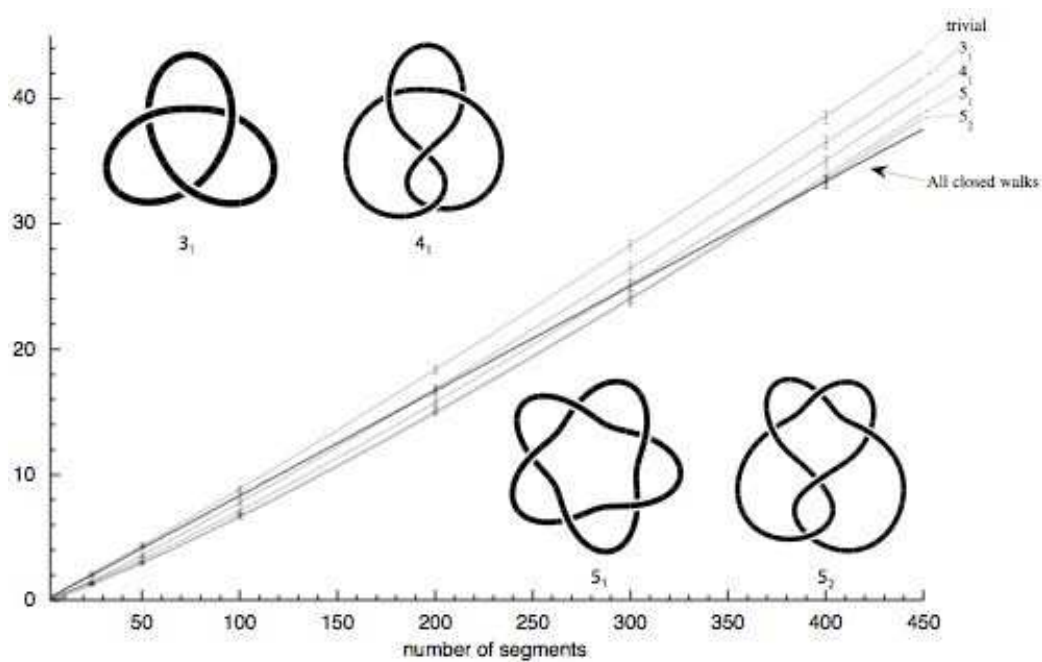
Η ίδια μελέτη έγινε και για ένα άλλο μέγεθος που χρησιμοποιείται συχνά για την μελέτη πολυμερικών αλυσίδων, την *γυροσκοπική ακτίνα* $\langle R_G^2 \rangle$. Η γυροσκοπική ακτίνα ορίζεται ως την μέση τετραγωνική απόσταση των ακμών του πολυγώνου από το κέντρο μάζας του πολυγώνου και εκφράζει το μέγεθος του πολυγώνου. Αποδεικνύεται ότι το μήκος ισορροπίας για την γυροσκοπική ακτίνα ενός τύπου κόμβου (Εικ. 4.2) είναι το ίδιο με το μήκος ισορροπίας για το μέσο αριθμό διασταυρώσεων ενός συγκεκριμένου τύπου κόμβου.

4.2 Μέσος αριθμός διασταυρώσεων δύο τυχαίων περιπάτων ή πολυγώνων

Στο [18] αναφέρονται περεταίρω γεωμετρικές ιδιότητες τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων κάνοντας χρήση του μέσου αριθμού διασταυρώσεων ανάμεσα σε δύο τυχαίους περίπατους ή δύο τυχαία πολύγωνα ICN. Το ICN έχει χρησιμοποιηθεί για να χαρακτηρίσει το μέγεθος της διαπλοκής δύο (ή περισσότερων) ανεξάρτητων πολυμερικών αλυσίδων αφαιρώντας την άγνοια της αυτόδιαπλοκής της κάθε αλυσίδας πολυμερούς.

Το παρακάτω θεώρημα αποδεικνύεται στο [18].

Θεώρημα 4.2.1. *Εστω X και Y δύο κανονικοί τυχαίοι περίπατοι ίσου μήκους n , τα αρχικά σημεία των οποίων απέχουν απόσταση $\rho \geq 0$. Εστω $\xi_n(\rho)$ ο αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ των X και Y τότε*



Σχήμα 4.2: Αριθμητικές προσομοιώσεις ιδανικών τυχαίων πολυγώνων δείχνουν την αυξητική τάση του $\langle R_G^2 \rangle$ τυχαίων πολυγώνων ως προς το μήκος των αλυσίδων. Η γραφική παράσταση της $\langle R_G^2 \rangle$ ενός τυχαίου πολυγώνου καθώς το μήκος του αυξάνει, τέμνει τη γραφική παράσταση της γυροσκοπικής ακτίνας ενός συγκεκριμένου τύπου κόμβου καθώς το μήκος του κόμβου αυξάνει. Το σημείο τομής ορίζει το μήκος ισορροπίας του κόμβου αυτού [17].

$$E(\xi_n(\rho)) = \frac{3 \ln 2}{8} n + \epsilon(n, \rho) \quad (4.31)$$

όπου $\epsilon(n, \rho)$ είναι ο όρος του σφάλματος και είναι φραγμένος από το $M(\ln n + \rho + \rho^2)\sqrt{n}$ για μία θετική σταθερά M που είναι ανεξάρτητη των n και ρ .

Για την απόδειξη του Θεωρήματος θα χρειαστούμε το παρακάτω λήμμα:

Λήμμα 4.2.2. Έστω l_1 και l_2 δύο ανεξάρτητα τυχαία διανύσματα ομοιόμορφα καταμεμημένα πάνω στην μοναδιαία σφαίρα. Αν τα αρχικά σημεία X και Y των δύο διανυσμάτων είναι τοποθετημένα έτσι ώστε η διαφορά τους $X - Y$ ικανοποιεί την κανονική κατανομή με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας

$$\left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{|X - Y|^2}{2\sigma^2}\right), \quad (4.32)$$

τότε έχουμε

$$E(\alpha(l_1, l_2)) = \frac{1}{16\sigma^2} + O\left(\frac{\ln \sigma}{\sigma^3}\right). \quad (4.33)$$

Απόδειξη του Θεωρήματος 4.3. Ας θεωρήσουμε την περίπτωση που $\rho = 0$ αρχικά. Σε αυτήν την περίπτωση, και οι δύο τυχαίοι περίπατοι X και Y θα αρχίζουν στο αρχικό σημείο. Έστω e_i η i -στή ακμή του X , και e'_j η j -στή ακμή του Y και $\alpha(e_i, e'_j)$ ο ACN μεταξύ των e_1 και e_2 , τότε

$$E(\xi_n(0)) = \sum_{1 \leq i, j \leq n} E(\alpha(e_i, e'_j)). \quad (4.34)$$

Άρα πρέπει να βρούμε το $E(\alpha(e_i, e'_j))$ για κάθε i, j . Προφανώς, αν $i + j \leq 2$, τότε $\alpha(e_i, e'_j) = 0$ άρα χρειάζεται μόνο να θεωρήσουμε την περίπτωση όταν $i + j \geq 3$. Έστω X_{i-1}, X_i τα άκρα της e_i και έστω Y_{j-1}, Y_j τα άκρα της e'_j , τότε η ακολουθία $X_{i-1}, X_{i-2}, \dots, X_1, 0, Y_1, \dots, Y_{j-1}$ μπορεί να θεωρηθεί ένας κανονικός τυχαίος περίπατος $k = i + j - 2$ ακμών που ξεκίνησε στο σημείο X_{i-1} . Με άλλα λόγια, οι e_i και e'_j μπορούν να θεωρηθούν σαν δύο ακμές ενός

τυχαίου περιπάτου και υπάρχουν $k = i + j - 2$ ακμές μεταξύ τους. Όπως δείξαμε στην απόδειξη του Θεωρήματος 4.1 έχουμε

$$E(\alpha(e_i, e'_j)) = \frac{3}{16k} + O\left(\frac{\ln k}{k^{\frac{3}{2}}}\right). \quad (4.35)$$

Συμπεραίνουμε ότι

$$\begin{aligned} E(\xi_n(0)) &= \sum_{1 \leq i, j \leq n, i+j \geq 3} E(\alpha(e_i, e'_j)) \\ &= \sum_{1 \leq i, j \leq n, i+j \geq 3} \frac{3}{16(i+j-2)} + O\left(\sum_{1 \leq i, j \leq n, i+j \geq 3} \frac{l(i+j-2)^{\frac{3}{2}}}{i+j-2}\right) \\ &= \frac{3}{16} \sum_{1 \leq k \leq n-1} \frac{k+1}{k} + \frac{3}{16} \sum_{0 \leq k \leq n-2} \frac{n-(k+1)}{n+k} + O(\sqrt{n} \ln n) \\ &= \frac{3 \ln 2}{8} n + O(\sqrt{n} \ln n) \end{aligned} \quad (4.36)$$

Σημειώνουμε ότι στα παραπάνω χρησιμοποιήσαμε τις παρακάτω εκτιμήσεις:

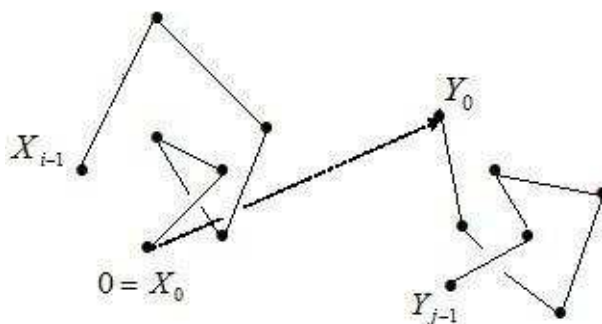
$$\sum_{1 \leq k \leq n-1} \frac{k+1}{k} = n + O(\ln n), \quad (4.37)$$

$$\sum_{1 \leq k \leq n-2} \frac{n-(k+1)}{n+k} = n \int_{[0,1]} \frac{1-x}{1+x} + O(1) = (2 \ln 2 - 1)n + O(1) \quad (4.38)$$

και

$$\sum_{1 \leq i, j \leq n, i+j \geq 3} \frac{\ln(i+j-2)}{(i+j-2)^{\frac{3}{2}}} < \sum_{1 \leq k \leq 2n-2} \frac{k \ln k}{k^{\frac{3}{2}}} = \sum_{1 \leq k \leq 2n-2} \frac{\ln k}{k^{\frac{1}{2}}} = O(\sqrt{n} \ln n).$$

Αυτό αποδεικνύει το Θεώρημα στην περίπτωση που $\rho = 0$. Τώρα ας θεωρήσουμε την περίπτωση που $\rho > 0$ και είναι σχετικά μικρό σε σύγκριση με το n , το μήκος των τυχαίων περιπάτων. .



Σχήμα 4.3: Δύο κανονικοί τυχαίοι περίπατοι που ξεκινούν από διαφορετικά σημεία

Σε αυτήν την περίπτωση, ο X παράγεται όπως πριν αλλά υπάρχει ένα επιπλέον βήμα για να παράγουμε τον Y . Πρώτα παράγουμε έναν κανονικό τυχαίο περίπατο n ακμών ξεκινώντας από την αρχή. Έπειτα επιλέγουμε μία τυχαία κατεύθυνση (δηλαδή ένα τυχαίο διάνυσμα που είναι ομοιόμορφα κατανεμημένο στην μοναδιαία σφαίρα) και μεταφέρουμε τον Y προς αυτήν την κατεύθυνση κατά μία απόσταση ρ . Με άλλα λόγια, το διάνυσμα $\vec{\rho}$ προστίθεται σε κάθε ακμή του Y (σαν διάνυσμα), Σχήμα 4.3. Για λόγους ευκολίας θα λέμε αυτόν τον μεταφερόμενο τυχαίο περίπατο πάλι Y . Οι ακμές του X θα ονομάζονται ακόμα X_{i-1} (με $i = 1$ έως $n+1$) και οι κορυφές του (μεταφερόμενου) Y θα ονομάζονται ακόμα Y_{j-1} ($1 \leq j \leq n+1$). Από την άλλη οι ακμές του Y πριν τη μεταφορά θα συμβολίζονται Y'_{j-1} .

Όπως πριν, εάν θέσουμε $\xi(\rho)$ να είναι ο ICN μεταξύ των X και Y

$$E(\xi_n(\rho)) = \sum_{1 \leq i, j \leq n} E(\alpha(e_i, e'_j)), \quad (4.40)$$

όπου e_i είναι η i -στή ακμή του X και e'_j είναι η j -στή ακμή του (μεταφερόμενου) Y . Το σκεπτικό που χρησιμοποιήσαμε στην απόδειξη του Θεωρήματος 4.1 δεν μπορεί να εφαρμοσθεί σε αυτήν την περίπτωση αφού η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του $Y_{j-1} - X_{i-1}$ έχει αλλάξει. Έστω $r = |Y_{j-1} - X_{i-1}| =$

$|\vec{\rho} + Y'_{j-1} + X_{i-1}|$ και $r_1 = |Y'_{j-1} - X_{i-1}|$. Από το Λήμμα 4.1.6 έχουμε (με σταθερά $\vec{\rho}$ και r_1)

$$E(\alpha(e_i, e'_j) | \vec{\rho}, r_1) = \frac{1}{16r_1^2} + O\left(\frac{1}{r_1^3}\right) \quad (4.41)$$

Έστω θ η γωνία μεταξύ των $\vec{\rho}$ και $Y'_{j-1} - X_{i-1}$. Έχουμε

$$r^2 = r_1^2 + \rho^2 - 2r_1\rho \cos \theta. \quad (4.42)$$

Όπως αναφέραμε πριν, η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του θ είναι $\frac{1}{2} \sin \theta$ και $0 \leq \theta \leq \pi$. Έτσι έχουμε

$$\begin{aligned} E(\alpha(e_2, e'_j) | r_1) &= \int_{[0,1]} \frac{1}{2} \sin \theta \left(\frac{1}{16r_1^2} + O\left(\frac{1}{r_1^3}\right) \right) d\theta \\ &= \frac{1}{64r_1\rho} \ln\left(\frac{r_1 + \rho}{r_1 - \rho}\right)^2 + O\left(\frac{1}{r_1(r_1^2 - \rho^2)}\right). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Αφού $\alpha(e_i, e'_j) \leq 1$, έχουμε $E(\alpha(e_i, e'_j) | r_1) \leq 1$ για κάθε r_1 . Συγκεκριμένα, μπορούμε να φράξουμε το $E(\alpha(e_i, e'_j) | r_1)$ με το 1 για κάθε $r_1 < 2\rho$. Από την άλλη, εάν $r_1 \geq 2\rho$, τότε έχουμε $\ln\left(\frac{r_1 + \rho}{r_1 - \rho}\right) = \frac{2\rho}{r_1} + O\left(\frac{\rho^2}{r_1^2}\right)$, $\frac{1}{r_1(r_1^2 - \rho^2)} = O\left(\frac{1}{r_1^3}\right)$ και

$$E(\alpha(e_i, e'_j)) = \frac{1}{16r_1^2} + \frac{1}{r_1^3}(O(1) + O(\rho)) \quad (4.44)$$

Εξ ορισμού,

$$\begin{aligned} E(\alpha(e_i, e'_j)) &= \int_{[0,k]} 4\pi r_1^2 f_k(r_1) E(\alpha(e_i, e'_j) | r_1) dr_1 \\ &\leq \int_{[0,2\rho]} 4\pi r_1^2 f_k(r_1) dr_1 + \int_{[2\rho,k]} 4\pi r_1^2 f_k(r_1) E(\alpha(e_i, e'_j) | r_1) dr_1, \end{aligned} \quad (4.45)$$

όπου

$$f_k(r_1) = \left(\left(\sqrt{\frac{3}{2\pi k}} \right)^3 \exp\left(-\frac{3r_1^2}{2k}\right) + O\left(\frac{1}{k^{\frac{5}{2}}}\right) \right) \quad (4.46)$$

όπως ορίζεται στο 4.2.2. Το πρώτο ολοκλήρωμα στην παραπάνω σχέση φράσσεται προφανώς από $O(\rho^2)\frac{1}{k^{\frac{3}{2}}}$. Από την άλλη, το δεύτερο ολοκλήρωμα στην παραπάνω σχέση εκτιμάται να είναι

$$\frac{3}{16k} + O\left(\frac{\ln k}{k^{\frac{3}{2}}}\right) + O(\rho)\frac{1}{k^{\frac{3}{2}}} \quad (4.47)$$

Αυτή η εκτίμηση γίνεται με παρόμοια ανάλυση με αυτή που χρησιμοποιείται στην απόδειξη του Θεωρήματος 4.1. Συνδυάζοντας τα παραπάνω αποτελέσματα, λαμβάνουμε

$$E(\alpha(e_i, e'_j)) = \frac{3}{16k} + (O(\ln k) + O(\rho) + O(\rho^2))\frac{1}{k^{\frac{3}{2}}} \quad (4.48)$$

όπου $k = i + j - 2 \geq 1$ $\rho = 0$. Τώρα μπορούμε να ακολουθήσουμε την ίδια απόδειξη όπως αυτήν της περίπτωσης $\rho = 0$ και να πάρουμε το παρακάτω αποτέλεσμα:

$$E(\xi_n(\rho)) = \frac{3 \ln 2}{8}n + O(\ln n + \rho + \rho^2) + \sqrt{n}. \quad (4.49)$$

□

Παρατηρούμε ότι η αυξητική τάση του αριθμού διασταυρώσεων ως προς το μήκος n των κανονικών τυχαίων περιπάτων θα είναι της μορφής $O(n)$ στην περίπτωση που η απόσταση των αρχικών τους σημείων ρ είναι σχετικά μικρή σε σύγκριση με το n . Φυσικά κάθε σταθερό ρ σε κάποιο σημείο θα γίνει μικρό σε σχέση με το μήκος των αλυσίδων καθώς οι αλυσίδες μεγαλώνουν, και ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων θα τείνει τελικά στην γραμμική συμπεριφορά $\frac{3 \ln 2}{8}n$.

Στην περίπτωση που το ρ είναι πολύ μεγαλύτερο από το n οι δύο τυχαίοι περίπατοι θα είναι (τις περισσότερες φορές) μακριά ο ένας από τον άλλο αφού η μέση διάμετρος ενός τυχαίου περιπάτου είναι της τάξης $O(\sqrt{n})$. Άρα οι προβολές τους δεν θα τέμνονται στα περισσότερα επίπεδα προβολής (δηλαδή οι αριθμοί διασταυρώσεων σε αυτές τις προβολές θα είναι όλοι μηδέν). Θέτουμε το αρχικό σημείο ενός τυχαίου περιπάτου να είναι στο κέντρο μίας σφαίρας

ακτίνας ρ και θεωρούμε το αρχικό σημείο του άλλου περιπάτου να είναι πάνω στη σφαίρα. Αφού η γυροσκοπική ακτίνα ενός τυχαίου περιπάτου μήκους n είναι της τάξης $O(\sqrt{n})$, τότε το εμβαδόν των προβολών στις οποίες ο αριθμός διασταυρώσεων μεταξύ των δύο τυχαίων περιπάτων είναι διάφορος του μηδενός θα είναι της τάξης $O(n)$. Άρα το $E(\xi_n(\rho))$ θα είναι ίσο με το εμβαδόν των προβολών ως προς τις οποίες ο αριθμός διασταυρώσεων είναι διάφορος του μηδενός προς το εμβαδόν όλης της σφαίρας, δηλαδή θα είναι της τάξης $O(\frac{n}{\rho^2})$. Στο [18] αυτό επιβεβαιώνεται μέσω αριθμητικών προσομοιώσεων και μάλιστα οι αυξητικές τάσεις των μέσων αριθμών διασταυρώσεων για τυχαίους περιπάτους των οποίων τα αρχικά σημεία απέχουν απόσταση $\rho \approx \sqrt{n}$, είτε $\rho \ll \sqrt{n}$ είτε $\rho \gg \sqrt{n}$ προσεγγίζονται όλες από μία συνάρτηση της μορφής $\frac{3 \ln 2}{8} n \frac{n+b\rho}{n+a\rho^3}$.

Στην περίπτωση που οι δύο κανονικοί τυχαίοι περίπατοι είναι διαφορετικού μήκους, αποδεικνύονται τα παρακάτω [18]:

Θεώρημα 4.2.3. Έστω EW_1 και EW_2 δύο τυχαίοι περίπατοι ίσου μήκους βήματος. Έστω n το μήκος του EW_1 και m το μήκος του EW_2 . Χωρίς έλλειψη γενικότητας μπορούμε να υποθέσουμε ότι $n \geq m$ και $r = \frac{n}{m} \geq 1$. Εάν τα αρχικά σημεία των EW_1 και EW_2 απέχουν μία μικρή απόσταση $\rho \geq 0$, τότε η μέση τιμή του μέσου ICN μεταξύ των EW_1 και EW_2 μπορεί να προσεγγιστεί από το $a_r m$ όπου

$$a_r = \frac{3}{16} \int_{[0,r]} dy \int_{[0,1]} \frac{1}{x+y} dx = \frac{3}{16} \ln \frac{(1+r)^{1+r}}{r^r} \quad (4.50)$$

και ο όρος σφάλματος είναι της τάξεως το πολύ $\sqrt{m} \ln m$.

Παρατήρηση 4.2.4. Παρατηρούμε ότι ο τύπος του παραπάνω θεωρήματος είναι συμμετρικός. Δηλαδή για $r = \frac{m}{n}$ τότε η μέση τιμή του μέσου ICN μεταξύ των EW_1 και EW_2 μπορεί να προσεγγιστεί από το $a_r n$.

Τέλος, στην περίπτωση δύο κανονικών τυχαίων πολυγώνων διαφορετικού μήκους αποδεικνύεται ότι [18] η αντίστοιχη μέση τιμή του μέσου αριθμού διασταυρώσεων μπορεί να εκφραστεί ως $b_r n$ (σύν έναν διορθωτικό όρο), όπου b_r ορίζεται ακριβώς με ένα ορισμένο ολοκλήρωμα και έχει την ιδιότητα $2a_r < b_r < 4a_r$.

Θεώρημα 4.2.5. Έστω EP_1 και EP_2 δύο τυχαία πολύγωνα ίσου βήματος. Έστω n το μήκος του EP_1 και m το μήκος του EP_2 . Χωρίς βλάβη της γενικότητας, μπορούμε να υποθέσουμε ότι $n \geq m$ και έστω $r = \frac{n}{m} \geq 1$. Εάν τα αρχικά σημεία των EP_1 και EP_2 απέχουν μία μικρή απόσταση $\rho \geq 0$, τότε η μέση τιμή του μέσου ICN μεταξύ των EP_1 και EP_2 μπορεί να προσεγγιστεί από $b_r m$ όπου

$$b_r = \frac{3}{4} \int_{[0, r/2]} dy \int_{[0, 1/2]} \frac{1}{x(1-x) + y(1-\frac{y}{r})} dx. \quad (4.51)$$

Κεφάλαιο 5

Ο αριθμός περιέλιξης και η συστροφή ομοιόμορφων τυχαίων προσανατολισμένων πολυγώνων σε περιορισμένους χώρους

Θα παρουσιάσουμε κάποια από τα αποτελέσματα που αφορούν την διαπλοκή ομοιόμορφων τυχαίων προσανατολισμένων πολυγώνων σε έναν περιορισμένο χώρο από τους J. Arsuaga, T. Blackstone, Y. Diao, E. Karadayii και M. Saito στο [19] και τα επεκτείνουμε για να εκτιμήσουμε την αυξητική τάση της μέσης τετραγωνικής συστρώσης ενός προσανατολισμένου τυχαίου πολυγώνου σε έναν περιορισμένο χώρο καθώς και την αυξητική τάση του αριθμού περιέλιξης ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας απλής επίπεδης κλειστής προσανατολισμένης καμπύλης.

Χρησιμοποιείται το μοντέλο URP που εισήγαγε ο K. Millett στο [14]. Αυτό το μοντέλο είναι πλύ διαφορετικό από τα τυχαία πολύγωνα ίσου βήματος και των

Γκαουσιανών τυχαίων πολυγώνων, καθώς δεν υπάρχει σταθερό μήκος δεσμών και κάθε συντεταγμένη μίας κορυφής του ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου ακολουθεί την ομοιόμορφη κατανομή πάνω από το $[0, 1]$. Αυτό το μοντέλο δείχνει ποιοτικά αποτελέσματα παρόμοια με αυτά άλλων μοντέλων για πολυμερή, και δίνει την δυνατότητα να παράγουμε ακριβείς αποδείξεις, ενώ ταυτόχρονα μειώνει σημαντικά τον υπολογιστικό χρόνο. Το μοντέλο URP δίνει την δυνατότητα σε κάποιον να προσομοιώνει κόμβους με έγáλο αριθμό τομών και επίσης να γεννα μεγάλα διαγραμματικά πρώτα διαγράμματα κόμβων [20].

5.1 Τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης και τετραγωνικός αριθμός συστροφής ομοιόμορφων τυχαίων προσανατολισμένων πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο

Το επόμενο Θεώρημα έχει αποδειχθεί στο [19].

Θεώρημα 5.1.1. *Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης μεταξύ δύο προσανατολισμένων ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων X και Y n ακμών το καθένα (στον περιορισμένο χώρο $C^3 = [0, 1]^3$) είναι $\frac{1}{2}n^2q$ όπου $q > 0$. Παρόμοια αποτελέσματα ισχύουν εάν το C^3 αντικατασταθεί από ένα συμμετρικό κυρτό σύνολο στον \mathbb{R}^3 .*

Παρατήρηση 5.1.2. *Παρατηρούμε ότι το παραπάνω αποτέλεσμα είναι ανεξάρτητο του προσανατολισμού των δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων. Η απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ των προσανατολισμένων τυχαίων πολυγώνων είναι σημαντική.*

Στην περίπτωση που είναι μόνο δύο (ανεξάρτητες) προσανατολισμένες ακμές l_1 και l_2 . Αφού όλα τα άκρα των ακμών είναι ανεξάρτητα και ομοιόμορφα κατανομημένα στο C^3 , η πιθανότητα οι προβολές των l_1 και l_2 , να τέμνουν η μία την άλλη είναι ένας θετικός αριθμός τον οποίο ονομάζουμε $2p$. Ορίζουμε μία τυχαία μεταβλητή ως εξής: $\epsilon = 0$ εάν οι προβολές των l_1 και l_2 δεν τέμνονται, $\epsilon = -1$ εάν οι προβολές των l_1 και l_2 έχουν αρνητική τομή και $\epsilon = 1$ εάν οι προβολές των l_1 και l_2 έχουν θετική τομή.

Τότε βλέπουμε ότι $P(\epsilon = 1) = P(\epsilon = -1) = p$, $E(\epsilon) = 0$ και $Var(\epsilon) = E(\epsilon^2) = 2p$. Για την απόδειξη του προηγούμενου Θεωρήματος θα χρησιμοποιήσουμε το παρακάτω Λήμμα που αφορά την περίπτωση όταν υπάρχουν τέσσερις ακμές (κάποιες από τις οποίες μπορεί να ταυτίζονται ή να έχουν μία κοινή κορυφή) αναμειγμένες: l_1, l_2, l'_1 και l'_2 . Έστω ϵ_1 ο τυχαίος αριθμός ϵ που ορίστηκε παραπάνω μεταξύ των l_1 και l'_1 και έστω ϵ_2 ο τυχαίος αριθμός που ορίζεται μεταξύ των l_2 και l'_2 .

Λήμμα 5.1.3. (1) Εάν τα άκρα των l_1, l_2, l'_1 και l'_2 είναι διαφορετικά,

τότε $E(\epsilon_1\epsilon_2) = 0$ (αυτή είναι η περίπτωση που υπάρχουν οχτώ ανεξάρτητα σημεία ανεμειγμένα).

(2) Εάν $l_1 = l_2$, και τα άκρα των l'_1 και l'_2 είναι διαφορετικά (αυτό μας ανάγει στην περίπτωση που υπάρχουν μόνο τρεις τυχαίες ακμές με έξι ανεξάρτητα σημεία ανεμειγμένα), τότε $E(\epsilon_1\epsilon_2) = 0$.

(3) Στην περίπτωση που $l_1 = l_2$, και l'_1 και l'_2 έχουν ένα κοινό σημείο (άρα υπάρχουν μόνο πέντε ανεξάρτητα σημεία αναμειγμένα σε αυτήν την περίπτωση), έστω $u = E(\epsilon_1\epsilon_2)$ και στην περίπτωση που l_1 και l_2 έχουν ένα κοινό σημείο, και l'_1 και l'_2 επίσης έχουν ένα κοινό σημείο (άρα υπάρχουν μόνο τέσσερις ακμές που ορίζονται από έξι ανεξάρτητα τυχαία σημεία ανεμειγμένα σε αυτά τα σημεία σε αυτήν την περίπτωση), έστω $E(\epsilon_1\epsilon_2) = v$. Έχουμε $q = p + 2(u + v) > 0$, όπου p ορίζεται όπως πριν.

Απόδειξη. (1) Είναι προφανές αφού ϵ_1 και ϵ_2 είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές σε αυτήν την περίπτωση.

(2) Για κάθε διαμόρφωση στην οποία οι προβολές των l'_1 και l'_2 τέμνουν και οι δύο την προβολή της l_1 (αφού αλλιώς $\epsilon_1\epsilon_2 = 0$), υπάρχουν οχτώ διαφορετικοί τρόποι για να βάλουμε προσανατολισμό στις ακμές. Τέσσερις από αυτούς δίνουν $\epsilon_1\epsilon_2 = -1$ και τέσσερις από αυτούς δίνουν $\epsilon_1\epsilon_2 = 1$. Αφού η από κοινού πυκνότητα πιθανότητας των κορυφών που αναμειγνύονται είναι απλά $\frac{1}{V^6}$, όπου V είναι ο όγκος του περιορισμένου χώρου C^3 , έτσι χρησιμοποιώντας ένα επιχείρημα συμμετρίας έχουμε $E(\epsilon_1\epsilon_2) = 0$.

(3) Θεωρούμε την περίπτωση που αφορά δύο τυχαία τρίγωνα. Τα προσανατολίζουμε και ονομάζουμε τις ακμές του πρώτου τριγώνου l_1, l_2 και l_3 . Ομοίως, ονομάζουμε τις ακμές του δεύτερου τριγώνου, l'_1, l'_2 και l'_3 . Έστω ϵ_{ij} ο προσεγγισμένος αριθμός της διασταύρωσης ϵ μεταξύ των ακμών l_i και l'_j . Θεωρούμε την διασπορά του αθροίσματος $\sum_{1 \leq i, j \leq 3} \epsilon_{ij}$ (οι δείκτες του αθροίσματος έχουν παρθεί με τη χρήση του $\pmod{8}$):

$$\begin{aligned} V\left(\sum_{1 \leq i, j \leq 3} \epsilon_{ij}\right) &= E\left(\left(\sum_{1 \leq i, j \leq 3} \epsilon_{ij}\right)^2\right) \\ &= \sum_{1 \leq i, j \leq 3} E(\epsilon_{ij}^2) + 2 \sum_{1 \leq i, j \leq 3} (E(\epsilon_{ij}\epsilon_{(i-1)j}) + E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i(j+1)})) \\ &\quad + 2 \sum_{1 \leq i \leq 3} (E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i+1, j+1}) + E(\epsilon_{i, j}\epsilon_{i-1, j+1})) \end{aligned} \quad (5.1)$$

Αφού τα ϵ_{ij} είναι ταυτόσιμες τυχαίες μεταβλητές, δηλαδή, έχουν τις ίδιες κατανομές, κάθε όρος στο πρώτο άθροισμα της δεξιάς πλευράς στην παραπάνω σχέση δίνει $2p$, κάθε όρος στο δεύτερο άθροισμα δίνει u (βλέπε λήμμα 5.1.3 (1)), και κάθε όρος στο τρίτο άθροισμα δίνει v . Υπάρχουν 9 όροι στο πρώτο άθροισμα, και 18 όροι στο δεύτερο άθροισμα. Έτσι έχουμε

$$V\left(\sum_{1 \leq i, j \leq 3} \epsilon_{ij}\right) = 18p + 36(u + v) = 18(p + 2(u + v)). \quad (5.2)$$

Αφού $V(\sum_{1 \leq i, j \leq 3} \epsilon_{ij}) > 0$, αυτό συνεπάγεται $p + 2(u + v) > 0$, όπως ισχυριστήκαμε. \square

Ας θεωρήσουμε την περίπτωση που δύο ομοιόμορφα τυχαία πολύγωνα R_1 και R_2 n κορυφών το καθένα. Ονομάζουμε τις ακμές των R_1 και R_2 l_1, l_2, \dots, l_n και l'_1, l'_2, \dots, l'_n έτσι ώστε αυτή η σειρά ταιριάζει με την σειρά που επάγει ο προσανατολισμός των πολυγώνων. Όπως και στην απόδειξη του Λήμματος 5.1.3, έστω ϵ_{ij} ο προσεγγισμένος αριθμός διασταύρωσης μεταξύ των l_i και l'_j . Τότε ο αριθμός περιέλιξης μεταξύ των R_1 και R_2 ορίζεται ως $\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \epsilon_{ij}$. Όπως δείξαμε στα κεφάλαια 2 και 3, ο αριθμός περιέλιξης μεταξύ δύο πολυγώνων είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη. Δηλαδή, ο αριθμός περιέλιξης υπολογισμένος από οποιαδήποτε κανονική προβολή (στην οποία υπάρχουν μόνο διπλές διασταυρώσεις) δύο πολυγώνων τοπολογικά ισοδύναμων με τα αρχικά παραμένει αμετάβλητος.

Απόδειξη του Θεωρήματος 5.1.1. Εύκολα μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι

$$E\left(\left(\sum_{1 \leq i, j \leq n} \epsilon_{ij}\right)^2\right) = \frac{1}{2}n^2q$$

□

Εργαζόμενοι όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 5.1.1 στο [19] θα αποδείξουμε και θα δείξουμε αριθμητικά το παρακάτω θεώρημα που αφορά την ασυμπτωτική τάση της μέσης τετραγωνικής συστροφής ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου.

Θεώρημα 5.1.4. *Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός συστροφής ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου P_n n ακμών (στον περιορισμένο χώρο C^3) είναι της τάξεως $O(n^2)$.*

Στην περίπτωση που είναι μόνο δύο (ανεξάρτητες) προσανατολισμένες ακμές l_1 και l_2 , αφού όλα τα άκρα των ακμών είναι ανεξάρτητα και ομοιόμορφα κατανομημένα στο C^3 , η πιθανότητα οι προβολές των l_1 και l_2 , να τέμνουν η μία την άλλη είναι ένας θετικός αριθμός τον οποίο ονομάζουμε $2p$. Ορίζουμε μία

τυχαία μεταβλητή ως εξής : $\epsilon = 0$ εάν οι προβολές των l_1 και l_2 δεν τέμνονται, $\epsilon = -1$ εάν οι προβολές των l_1 και l_2 έχουν αρνητική τομή και $\epsilon = 1$ εάν οι προβολές των l_1 και l_2 έχουν θετική τομή.

Τότε βλέπουμε ότι $P(\epsilon = 1) = P(\epsilon = -1) = p$, $E(\epsilon) = 0$ και $Var(\epsilon) = E(\epsilon^2) = 2p$.

Θα χρειαστούμε το επόμενο Λήμμα, ακολουθώντας το μοντέλο του αντίστοιχου Λήμματος 5.1.3 στο [19], που αφορά την περίπτωση όταν υπάρχουν τέσσερις ακμές (κάποιες απο τις οποίες μπορεί να ταυτίζονται ή να έχουν μία κοινή κορυφή) αναμειγμένες : l_1, l_2, l'_1 και l'_2 . Έστω ϵ_1 ο τυχαίος αριθμός ϵ που ορίστηκε παραπάνω μεταξύ των l_1 και l'_1 και έστω ϵ_2 ο τυχαίος αριθμός που ορίζεται μεταξύ των l_2 και l'_2 .

Λήμμα 5.1.5. (1) Εάν τα άκρα των l_1, l_2, l'_1 και l'_2 είναι διαφορετικά,

τότε $E(\epsilon_1\epsilon_2) = 0$ (αυτή είναι η περίπτωση που υπάρχουν οχτώ ανεξάρτητα σημεία ανεμειγμένα).

(2) Εάν $l_1 = l_2$, και τα άκρα των l_1, l'_1 και l'_2 είναι διαφορετικά (αυτό μας ανάγει στην περίπτωση που υπάρχουν μόνο τρεις τυχαίες ακμές με έξι ανεξάρτητα σημεία ανεμειγμένα), τότε $E(\epsilon_1\epsilon_2) = 0$.

(3) Εάν τα l_1 και l'_1 , ή τα l_2 και l'_2 έχουν μία κοινή κορυφή, τότε $E(\epsilon_1\epsilon_2) = 0$ (αυτή είναι η περίπτωση που έχουμε τέσσερις ακμές και μόνο επτά ανεξάρτητα σημεία).

(4) Στην περίπτωση που $l_1 = l_2$, τα άκρα των l_1 και l'_1 και l_1 και l'_2 είναι διαφορετικά, και l'_1 και l'_2 έχουν ένα κοινό σημείο (άρα υπάρχουν μόνο τρεις ακμές που ορίζονται από πέντε ανεξάρτητα σημεία ανεμειγμένα σε αυτήν την περίπτωση), έστω $u = E(\epsilon_1\epsilon_2)$, στην περίπτωση που l_1 και l_2 έχουν ένα κοινό σημείο, τα άκρα των l_1 και l'_1 και l_1 και l'_2 είναι διαφορετικά, και l'_1 και l'_2 επίσης έχουν ένα κοινό σημείο (άρα υπάρχουν μόνο τέσσερις ακμές που ορίζονται από έξι ανεξάρτητα τυχαία σημεία ανεμειγμένα σε αυτά τα σημεία σε αυτήν την περίπτωση), έστω $v = E(\epsilon_1\epsilon_2)$ και έστω $w = E(\epsilon_1, \epsilon_2)$ στην περίπτωση που οι l_1, l_2, l'_1 και l'_2 είναι διαδοχικές (άρα υπάρχουν μόνο τέσσερις ακμές που

ορίζονται από πέντε ανεξάρτητα σημεία σε αυτήν την περίπτωση). Έχουμε $q' = 3p + 2(2u + v + w) > 0$, όπου p ορίζεται όπως πριν.

Παρατήρηση 5.1.6. Παρατηρούμε ότι τα u, v και p είναι αυτά που ορίσαμε στην απόδειξη του Λήμματος 5.1.3.

Απόδειξη. (1) Είναι προφανές αφού ϵ_1 και ϵ_2 είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές σε αυτήν την περίπτωση.

(2) Για κάθε διαμόρφωση στην οποία οι προβολές των l'_1 και l'_2 τέμνουν και οι δύο την προβολή της l_1 (αφού αλλιώς $\epsilon_1\epsilon_2 = 0$), υπάρχουν οχτώ διαφορετικοί τρόποι για να βάλουμε προσανατολισμό στις ακμές. Τέσσερις από αυτούς δίνουν $\epsilon_1\epsilon_2 = -1$ και τέσσερις από αυτούς δίνουν $\epsilon_1\epsilon_2 = 1$. Αφού η από κοινού πυκνότητα πιθανότητας των κορυφών που αναμειγνύονται είναι απλά $\frac{1}{V^8}$, όπου V είναι ο όγκος του περιορισμένου χώρου C^3 , έτσι χρησιμοποιώντας ένα επιχείρημα συμμετρίας έχουμε $E(\epsilon_1\epsilon_2) = 0$.

(3) Είναι προφανές, αφού σε αυτήν την περίπτωση $\epsilon_1 = 0$ ή $\epsilon_2 = 0$.

(4) Ας μελετήσουμε την περίπτωση που το πολύγωνο έχει έξι ακμές. Έστω ϵ_{ij} ο αλγεβρικός αριθμός διασταύρωσης ϵ μεταξύ των ακμών l_i και l_j . Θεωρούμε την διασπορά του αθροίσματος $\sum_{1 \leq i < j \leq 6, 2 \leq |i-j| \leq 4} \epsilon_{ij}$ (οι δείκτες του αθροίσματος έχουν παρθεί με τη χρήση του $\pmod{6}$):

$$\begin{aligned}
V \left(\sum_{1 \leq i < j \leq 6, 2 \leq |i-j| \leq 4} \epsilon_{ij} \right) &= E \left(\left(\sum_{1 \leq i < j \leq 6, 2 \leq |i-j| \leq 4} \epsilon_{ij} \right)^2 \right) \\
&= \sum_{1 \leq i < j \leq 6, 2 \leq |i-j| \leq 4} E(\epsilon_{ij}^2) + 2 \sum_{1 \leq i \leq 6} \sum_{i+2 \leq j \leq i+3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i(j+1)}) \\
&\quad + 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq 6, |i-j|=3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i+1, j+1}) \\
&\quad + 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq 6, |i-j|=2} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i-1, j+1}) \\
&\quad + 2 \sum_{1 \leq i \leq 6} E(\epsilon_{i(i+2)}\epsilon_{i+1, i+3})
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Αφού τα ϵ_{ij} είναι ταυτόσιμες τυχαίες μεταβλητές, δηλαδή, έχουν τις ίδιες κατανομές, κάθε όρος στο πρώτο άθροισμα της δεξιάς πλευράς στην παραπάνω σχέση δίνει $2p$, κάθε όρος στο δεύτερο άθροισμα δίνει u , κάθε όρος στο τρίτο και τέταρτο άθροισμα δίνει v και κάθε όρος στο πέμπτο άθροισμα δίνει w . Έτσι έχουμε

$$V\left(\sum_{1 \leq i, j \leq 6} \epsilon_{ij}\right) = 9 \cdot 2p + 2(12 \cdot u + 6 \cdot v + 6 \cdot w) = 6(3p + 2(2u + v + w)). \quad (5.5)$$

Αφού $V(\sum_{1 \leq i, j \leq 8} \epsilon_{ij}) > 0$, αυτό συνεπάγεται $3p + 2(2u + v + w) > 0$, όπως ισχυριστήκαμε. \square

Ας θεωρήσουμε την περίπτωση ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου P_n με n ακμές. Ονομάζουμε τις ακμές του P_n ως l_1, \dots, l_n έτσι ώστε αυτή η σειρά ταιριάζει με την σειρά που επάγει ο προσανατολισμός του πολυγώνου. Όπως στην απόδειξη του Λήμματος 5.1.3, έστω ϵ_{ij} το πρόσημο της τομής μεταξύ των l_i και l_j . Τότε ο αριθμός της συστροφής ενός διαγράμματος του P_n που ορίζεται μέσω μιας προβολής σε επίπεδο κάθετο σε ένα τυχαίο διάνυσμα $\xi \in S^2$ ορίζεται ως $Wr_\xi(P_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq n, 2 \leq |i-j| \leq n-2} \epsilon_{ij}$.

Απόδειξη του Θεωρήματος 5.1.4. Ο χώρος των δυνατών διαμορφώσεων σε αυτήν την περίπτωση είναι ο $\Omega = [0, 1]^{3n} \setminus N$ όπου N είναι το σύνολο των πολυγωνικών αλυσίδες με αυτοτομές. Ο Ω είναι χώρος μέτρου με την σ-άλγεβρα Borel στο Ω και μέτρο το μέτρο Lebesgue, με $\mu(N) = 0$. Εφαρμόζοντας το Λήμμα 5.1.3, είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι η μέση τιμή της συστροφής ενός διαγράμματος του P_n ως προς τον χώρο των δυνατών διαμορφώσεων Ω είναι

$$\begin{aligned}
E\left(\sum_{1 \leq i < j \leq n, |i-j| \geq 2} \epsilon_{ij}^2\right) &= \\
&= \sum_{1 \leq i < j \leq n, 2 \leq |i-j| \leq n-1} E(\epsilon_{ij}^2) + 2 \sum_{1 \leq i \leq n} \sum_{i+1 \leq j \leq i+n-3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i,j+1}) \\
&+ 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq 6, 3 \leq |i-j| \leq n-3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i+1, j+1}) \\
&+ 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n, 2 \leq |i-j| \leq n-4} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i-1, j+1}) \\
&2 \sum_{1 \leq i \leq n} E(\epsilon_{i, i+2}\epsilon_{i+1, i+3}) \\
&= n^2(p + 2(u + v)) - n(3p + 2(4u + 5v - w))
\end{aligned} \tag{5.6}$$

όπου $p + 2(u + v) = q > 0$, όπως έχει αποδειχθεί στο Λήμμα 5.1.3 και άρα $E[Wr(P_n)] = qn^2 + O(n)$. Χρησιμοποιώντας τα λήμματα 5.1.3, 5.1.5 αποδεικνύεται ότι το $E[Wr(P_n)]$ είναι φραγμένο από κάτω από το $qn^2 - 6qn$.

Η τετραγωνική συστροφή του P_n είναι η μέση συστροφή $Wr_\xi(P_n)$ ως προς όλες τις δυνατές προβολές στο τετράγωνο, δηλαδή $Wr(P_n)^2 = \left(\frac{1}{4\pi} \int_{\xi \in S^2} Wr_\xi(P_n) dS\right)^2$. Τότε η μέση τετραγωνική συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου P_n ως προς τον χώρο των δυνατών διαμορφώσεων θα συμβολίζεται $E[Wr(P_n)^2]$.

Έστω μία διαμέριση της επιφάνειας της σφαίρας $\Delta = \{I_1, I_2, \dots, I_m\}$ και ας θεωρήσουμε ότι η συστροφή ενός διαγράμματος του P_n είναι σταθερή σε κάθε $I_j, 1 \leq j \leq m$. Εξ ορισμού, έχουμε ότι για μία ακολουθία διαμερίσεων Δ_k τέτοια ώστε $\mu(\Delta_k) \rightarrow 0$ η μέση τετραγωνική συστροφή του P_n ισούται με

$$\begin{aligned}
E[Wr^2(P_n)] &= \frac{1}{16\pi^2} E\left[\left(\lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \sum_{1 \leq \xi \leq m} Wr_\xi(P_n) \delta S\right)^2\right] \\
&= \frac{1}{16\pi^2} \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} E\left[\left(\sum_{1 \leq \xi \leq m} Wr_\xi^2(P_n) \delta S^2 + 2 \sum_{1 \leq \xi_1, \xi_2 \leq m} Wr_{\xi_1}(P_n) Wr_{\xi_2}(P_n) \delta S^2\right)\right] \\
&= \frac{1}{16\pi^2} \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_{1 \leq \xi \leq m} E[Wr_\xi^2(P_n)] \delta S^2 + 2 \sum_{1 \leq \xi_1, \xi_2 \leq m} E[Wr_{\xi_1}(P_n)] E[Wr_{\xi_2}(P_n)] \delta S^2\right)
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Χρησιμοποιήσαμε το Θεώρημα Κυριαρχημένης Σύγκλισης του Lebesgue, αφού οι $S_m(P_n) = \sum_{1 \leq \xi \leq m} Wr_\xi^2(P_n) \delta S^2 + 2 \sum_{1 \leq \xi_1, \xi_2 \leq m} Wr_{\xi_1}(P_n) Wr_{\xi_2}(P_n) \delta S^2$ είναι πραγματικές, μετρήσιμες συναρτήσεις στον χώρο μέτρου Ω και

$$S_m(P_n) = (\sum_{1 \leq \xi \leq m} Wr_\xi(P_n) \delta S)^2 \leq (\sum_{1 \leq \xi \leq m} Cr_\xi(P_n) \delta S)^2 \leq 10^3 n^4$$

όπου η $g = 10^3 n^4$ είναι ολοκληρώσιμη συνάρτηση. Όμως αποδείξαμε ότι $E[Wr_\xi^2(P_n)] = O(n^2)$, και $E[Wr_\xi] = 0$, $\forall \xi \in S^2$ οπότε

$$\begin{aligned} E[Wr^2(P_n)] &= \frac{1}{16\pi^2} \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_m O(n^2) \delta S^2 \right) \\ &\Rightarrow \frac{1}{4\pi} O(n^2) \leq E[Wr^2(P_n)] \leq O(n^2) \quad (5.8) \\ &\Rightarrow E[Wr^2(P_n)] = O(n^2) \end{aligned}$$

□

5.2 Διαπλοκή μεταξύ μίας προσανατολισμένης καμπύλης και ενός προσανατολισμένου τυχαίου πολύγωνου σε περιορισμένο χώρο

Μία ακριβής απόδειξη της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς της πιθανότητας της διαπλοκής μεταξύ μίας προσανατολισμένης καμπύλης σταθερού μήκους και ενός προσανατολισμένου τυχαίου πολύγωνου που βρίσκονται περιορισμένα σε ένα κυρτό συμπαγές χώρο δίνεται στο [19].

Θεώρημα 5.2.1. Έστω S μία σταθερή απλή κλειστή καμπύλη και R_n ένα ομοιόμορφο τυχαίο πολύγωνο n κορυφών, περιορισμένα στο εσωτερικό ενός συμμετρικού κυρτού συνόλου του \mathbb{R}^3 . Τότε καθώς το n τείνει στο άπειρο, η

πιθανότητα τα S και R_n να σχηματίζουν ένα μή διαχωριζόμενο κρίκο τείνει στο 1 με ρυθμό τουλάχιστον $1 - O(\frac{1}{\sqrt{n}})$.

Για την απόδειξη του παραπάνω Θεωρήματος θα χρειαστούμε το επόμενο Θεώρημα από την Θεωρία Πιθανοτήτων.

Θεώρημα 5.2.2. Έστω x_1, x_2, \dots, x_n μία ακολουθία στάσιμων και m -ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών τέτοιες ώστε $E(x_i) = 0, E(x_i^2) < \infty$ για κάθε i και

$$0 < C = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} E\left(\left(\sum_{1 \leq i \leq n} x_i\right)^2\right) < \infty, \quad (5.9)$$

τότε το $\frac{1}{\sqrt{nC}} \sum_{1 \leq i \leq n} x_i$ συγκλίνει στην κανονική τυχαία μεταβλητή. Επιπλέον, εάν θέσουμε $\Phi(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{(-\infty, \alpha)} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$ να είναι η συνάρτηση κατανομής της κανονικής τυχαίας μεταβλητής, τότε έχουμε

$$\left|P\left(\frac{1}{\sqrt{nC}} \sum_{1 \leq i \leq n} x_i \leq \alpha\right) - \Phi(\alpha)\right| \leq \frac{A}{\sqrt{n}} \quad (5.10)$$

για κάποια σταθερά $A > 0$.

Παρατήρηση 5.2.3. Για την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας μίας τυχαίας μεταβλητής X η οποία ακολουθεί την Κανονική κατανομή $N(\mu, \sigma^2)$ ισχύει:

$$F(x) = P(X \leq x) = \Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right) \quad (5.11)$$

Παρατήρηση 5.2.4. Εάν m είναι ένας μη αρνητικός ακέραιος, μία ακολουθία X_μ τυχαίων μεταβλητών είναι m -εξαρτημένη εάν τα X_1, X_2, \dots, X_s είναι ανεξάρτητα των X_t, X_{t+1}, \dots όπου $t - s > m$.

Απόδειξη του Θεωρήματος 5.2.1. Για απλότητα, θα θεωρήσουμε ότι ο περιορισμένος χώρος είναι ο κύβος που ορίζεται από το σύνολο $(x, y, z) : -\frac{1}{2} \leq x \leq \frac{1}{2}$ και θα θεωρήσουμε ότι η απλή κλειστή καμπύλη είναι ο κύκλος S στο xy -επίπεδο του οποίου η εξίσωση είναι $x^2 + y^2 = r^2$, όπου $r > 0$ είναι μία σταθερή που είναι

μικρότερη από $\frac{1}{2}$. Έστω ϵ_j το άθροισμα των ± 1 που αντιστοιχούν στις διασταυρώσεις μεταξύ των προβολών της στής j ακμής l_j του R_n και του S , πρέπει να πάρουμε το άθροισμα αφού σε αυτήν την περίπτωση η προβολή του l_j (πάνω στο xy -επίπεδο) μπορεί να έχει μέχρι 2 διασταυρώσεις με το S . Είναι εύκολο να δούμε ότι $\epsilon_j = 0, \pm 1, \pm 2$ για κάθε j , τα ϵ_j έχουν τις ίδιες κατανομές και λόγω συμμετρίας έχουμε $E(\epsilon_j) = 0$ για κάθε j . Είναι προφανές ότι εάν $|i - j| > 1 \pmod{(n)}$, τότε τα ϵ_i και ϵ_j είναι ανεξάρτητα, άρα έχουμε $E(\epsilon_i \epsilon_j) = 0$. Με ένα παρόμοιο επιχειρήμα σαν ευτό που χρησιμοποιήσαμε στο Θεώρημα 5.1.4, έχουμε $p' + 2u' > 0$, όπου $p' = E(\epsilon_1^2)$ και $u' = E(\epsilon_1 \epsilon_2)$. Άρα

$$0 < C = \frac{1}{n} E\left(\left(\sum_{1 \leq j \leq n} \epsilon_j\right)^2\right) = p' + u' \quad (5.12)$$

για κάθε n . Εάν αγνοήσουμε τον τελευταίο όρο ϵ_n στην παραπάνω σχέση, τότε ακόμα έχουμε

$$0 < C = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} E\left(\left(\sum_{1 \leq j \leq n-1} \epsilon_j\right)^2\right) = p' + u'. \quad (5.13)$$

Επιπλέον, είναι προφανές ότι η ακολουθία $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_{n-1}$ είναι μία 2-στάσιμη και εξαρτώμενη ακολουθία τυχαίων αριθμών αφού τα ϵ_j έχουν τις ίδιες κατανομές, και το τί συμβαίνει στα $\epsilon_1, \dots, \epsilon_j$ δεν επηρεάζει το τί συμβαίνει στα $\epsilon_{j+3}, \dots, \epsilon_{n-1}$ (άρα είναι ανεξάρτητα)

Από το Θεώρημα 5.2.2, υπάρχει μία σταθερά $A > 0$ τέτοια ώστε

$$\left|P\left(\frac{1}{\sqrt{nC}} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq \alpha - \Phi(\alpha)\right)\right| \leq \frac{A}{\sqrt{n}} \quad (5.14)$$

όπου $\Phi(\alpha)$ είναι η κανονική συνάρτηση κατανομής. Έχουμε

$$\begin{aligned}
P(Lk(S, R_n) \neq 0) &= P\left(\sum_{1 \leq i \leq n} \epsilon_i \neq 0\right) \\
&\geq 1 - P\left(-\alpha - \frac{2}{\sqrt{nC}} \leq \frac{1}{\sqrt{nC}} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq \alpha + \frac{2}{\sqrt{nC}}\right) \quad (5.15) \\
&\geq 1 - P\left(\Phi\left(\alpha + \frac{2}{\sqrt{nC}}\right) - \Phi\left(-\alpha - \frac{2}{\sqrt{nC}}\right)\right) - 2\frac{A}{\sqrt{n}},
\end{aligned}$$

όπου $Lk(S, R_n)$ είναι ο αριθμός περιέλιξης μεταξύ των S και R_n και $\alpha > 0$ είναι ένας τυχαίος αριθμός (αφού $|\epsilon_n| \leq 2$). Έχουμε ότι

$$P(\text{ο αριθμός περιέλιξης μεταξύ των } S \text{ και } R_n \neq 0) \geq 1 - O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right).$$

Άρα η πιθανότητα τα S και R_n να έχουν αριθμό περιέλιξης διάφορο του μηδενός πλησιάζει το 1 με ρυθμό $1 - O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$. \square

Στο [19] η πιθανότητα διαπλοκής δύο τυχαίων πολυγώνων ερευνάται και αριθμητικά, και συμπεραίνεται ότι η πιθανότητα δύο ομοιόμορφα τυχαία πολύγωνα να είναι πεπλεγμένα τείνει στο 1 καθώς το πλήθος των κορυφών των πολυγώνων τείνει στο άπειρο.

Ακολουθώντας την απόδειξη του Θεωρήματος 5.2.1, αποδεικνύουμε το παρακάτω Θεώρημα για την ασυμπτωτική τάση της απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης μεταξύ ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας απλής κλειστής καμπύλης.

Θεώρημα 5.2.5. Έστω R_n ένα προσανατολισμένο ομοιόμορφο τυχαίο πολύγωνο n ακμών και S μία σταθερή απλή κλειστή καμπύλη περιορισμένα στο εσωτερικό ενός συμμετρικού κυρτού συνόλου του \mathbb{R}^3 . Η μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ των X και S στον περιορισμένο χώρο ακολουθεί μία αυξητική τάση ως προς το μήκος του πολυγώνου της μορφής

$$E(|L(R_n, S)|) \approx O(\sqrt{n}). \quad (5.16)$$

Παρατήρηση 5.2.6. Η σχεδόν κανονική κατανομή είναι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της απόλυτης τιμής μίας τυχαίας μεταβλητής που ακολουθεί

την κανονική κατανομή με μέση τιμή 0 και διασπορά σ^2 . Δηλαδή εάν η X είναι κανονικά κατανομημένη με μέση τιμή 0 και διασπορά τότε η $Y = |X|$ είναι σχεδόν κανονικά κατανομημένη.

Τότε η μέση τιμή της δίνεται ως $E(Y) = \sigma \sqrt{\frac{2}{\pi}}$.

Η διασπορά της είναι $Var(Y) = \sigma^2(1 - \frac{2}{\pi})$.

Απόδειξη του Θεωρήματος 5.2.5. Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε την απλή κλειστή καμπύλη τον κύκλο με εξίσωση $x^2 + y^2 = r^2$ όπου $r > 0$ είναι μία σταθερά μικρότερη από $\frac{1}{2}$ και ο περιορισμένος χώρος να είναι ο $C = \{(x, y, z) : -\frac{1}{2} \leq x, y, z \leq \frac{1}{2}\}$. Έστω ϵ_j το άθροισμα των ± 1 που αντιστοιχούν στις διασταυρώσεις μεταξύ των προβολών της στής j ακμής l_j του R_n και του S , πρέπει να πάρουμε το άθροισμα αφού σε αυτήν την περίπτωση η προβολή του l_j (πάνω στο xy -επίπεδο) μπορεί να έχει μέχρι 2 διασταυρώσεις με το S . Είναι εύκολο να δούμε ότι $\epsilon_j = 0, \pm 1, \pm 2$ για κάθε j , τα ϵ_j έχουν τις ίδιες κατανομές και λόγω συμμετρίας έχουμε $E(\epsilon_j) = 0$ για κάθε j . Είναι προφανές ότι εάν $|i-j| > 1 \pmod{n}$, τότε τα ϵ_i και ϵ_j είναι ανεξάρτητα, άρα έχουμε $E(\epsilon_i \epsilon_j) = 0$. Με ένα παρόμοιο επιχείρημα σαν ευτό που χρησιμοποιήσαμε στο Θεώρημα 5.1.4, έχουμε $p' + 2u' > 0$, όπου $p' = E(\epsilon_1^2)$ και $u' = E(\epsilon_1 \epsilon_2)$. Τότε για $n = 3$

$$\begin{aligned} V\left(\sum_{1 \leq i \leq 3} \epsilon_i\right) &= E\left[\left(\sum_{1 \leq i \leq 3} \epsilon_i\right)^2\right] = \sum_{1 \leq i \leq 3} E(\epsilon_i^2) + \sum_{1 \leq i, j \leq 3} E(\epsilon_i \epsilon_j) \\ &= 3p' + 3u' = 3(p' + u') > 0 \end{aligned} \quad (5.17)$$

Άρα, έχουμε $p' + 2u' > 0$ $p' = E(\epsilon_i^2)$ $u' = E(\epsilon_i \epsilon_j)$. Άρα

$$0 < C = \frac{1}{n} E\left(\left(\sum_{1 \leq j \leq n} \epsilon_j\right)^2\right) = p' + 2u' \quad (5.18)$$

για κάθε n . Εάν αγνοήσουμε τον τελευταίο όρο ϵ_n στην παραπάνω σχέση, τότε ακόμα έχουμε

$$0 < C = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n-1} E\left(\left(\sum_{1 \leq j \leq n-1} \epsilon_j\right)^2\right) = p' + 2u'.$$

Επιπλέον, είναι προφανές ότι η ακολουθία $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_{n-1}$ είναι μία 2-στάσιμη και εξαρτώμενη ακολουθία τυχαίων αριθμών αφού τα ϵ_j έχουν τις ίδιες κατανομές, και το τί συμβαίνει στα $\epsilon_1, \dots, \epsilon_j$ δεν επηρεάζει το τί συμβαίνει στα $\epsilon_{j+3}, \dots, \epsilon_{n-1}$ (άρα είναι ανεξάρτητα).

Από το Θεώρημα 5.2.2, υπάρχει μία σταθερά $A > 0$ τέτοια ώστε

$$\begin{aligned} & |P\left(\frac{1}{\sqrt{(n-1)(p'+2u')}} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq \alpha\right) - \Phi(\alpha)| \leq \frac{A}{\sqrt{n-1}} \\ \Rightarrow & |P\left(\sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq \alpha \sqrt{(n-1)(p'+2u')}\right) - \Phi(\alpha)| \leq \frac{A}{\sqrt{n-1}} \quad (5.19) \\ \Rightarrow & |P\left(\sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq w\right) - \Phi\left(\frac{w}{\sqrt{(n-1)(p'+2u')}}\right)| \leq \frac{A}{\sqrt{n-1}} \end{aligned}$$

όπου $w = \alpha \sqrt{(n-1)(p'+2u')}$.

Σημειώνουμε ότι ο αριθμός περιέλιξης μεταξύ του προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου R_n και του S ισούται με $\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n} \epsilon_i$.

Τότε καθώς $n \rightarrow \infty$, $\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \rightarrow Z$, όπου Z είναι μία τυχαία μεταβλητή που ακολουθεί την κανονική κατανομή με μέση τιμή 0 και διασπορά $\sigma^2 = \frac{1}{4}(n-1)(p'+2u')$, δηλαδή $N(0, \frac{1}{4}(n-1)(p'+2u'))$. Άρα η τυχαία μεταβλητή $|\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i|$ ακολουθεί τη σχεδόν κανονική κατανομή και $E[|\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i|] = \frac{1}{2} \sqrt{(n-1)(p'+2u')} \sqrt{\frac{2}{\pi}} = O(\sqrt{n})$.

Άρα $|E[|\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i|] - E[|\frac{1}{2} \epsilon_n|]| \leq E[|Lk(R_n, S)|] \leq E[|\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i|] + E[|\frac{1}{2} \epsilon_n|]$.

Όμως $E[|\frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i|] = O(\sqrt{n})$ και $E[|\epsilon_n|]$ είναι μία σταθερά ανεξάρτητη του n , άρα $E[|L(R_n, S)|] = O(\sqrt{n})$.

□

Κεφάλαιο 6

Αριθμητικά αποτελέσματα

Σε αυτή την ενότητα θα παραθέσουμε τα αποτελέσματα των παρακάτω προσομοιώσεων για ομοιόμορφα τυχαία πολύγωνα και περιπάτους σε περιορισμένο χώρο και για κανονικά τυχαία πολύγωνα και περιπάτους. Αρχικά μελετάμε την αυξητική τάση της μέσης τετραγωνικής συστροφής, $E[Wr^2]$, και την μέση απόλυτη τιμή της συστροφής, $E[|Wr|]$ ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου με n ακμές σε περιορισμένο χώρο. Έπειτα εξετάζουμε την αυξητική τάση της απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης $E[|Lk|]$, μεταξύ ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου n ακμών και μίας επίπεδης καμπύλης και μεταξύ δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων n ακμών σε περιορισμένο χώρο. Στη συνέχεια, μελετάμε την αυξητική τάση της μέσης απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης, $\langle ALN \rangle$, μεταξύ δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων n ακμών, και την αυξητική τάση της μέσης απόλυτης τιμής του αριθμού αυτοπεριέλιξης, $\langle ASL \rangle$, ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου n ακμών, ως προς τον αριθμό των ακμών.

Για να παράγουμε ομοιόμορφα τυχαία πολύγωνα και ομοιόμορφους τυχαίους περιπάτους περιορισμένους στο $C^3 = [0, 1]^3$, κάθε συντεταγμένη μίας κορυφής του ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου επιλέχθηκε από την ομοιόμορφη κατανομή στο $[0, 1]$. Για να μελετήσουμε την ασυμπτωτική τάση του αριθμού περιέλιξης δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων, έχουν παραχθεί κανονικοί τυχαίοι περίπατοι

επιλέγοντας κάθε ακμή από την ομοιόμορφη κατανομή στην S^2 .

Για τον υπολογισμό του αριθμού περιέλιξης δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων, ή δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων και της συστροφής ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου ή ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου χρησιμοποιήσαμε τον αλγόριθμο στο [37], ο οποίος βασίζεται στο ολοκλήρωμα κατά Gauss. Για κάθε ζεύγος ακμών e_1, e_2 , ο αριθμός περιέλιξής τους υπολογίζεται ως το προσανατολισμένο εμβαδό δύο αντιδιαμετρικών στέρεων γωνίων που ορίζονται από τις δύο ακμές προς το εμβαδό της σφαίρας, (δείτε παραδείγματα 1 και 2).

Για τον υπολογισμό του αριθμού περιέλιξης ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας επίπεδης καμπύλης ανάγαμε το πρόβλημα σε δύο διαστάσεις και έχουν παραχθεί n το πλήθος σημεία ακολουθώντας την ομοιόμορφη κατανομή μέσα στο τετράγωνο πλευράς 1. Έτσι υπολογίσαμε τον μισό του αλγεβρικού αριθμού των τομών του πολυγώνου με το ευθύγραμμο τμήμα $-\frac{1}{2} \leq x \leq \frac{1}{2}, y = 0$.

Εκτιμήσαμε τον αριθμό περιέλιξης μεταξύ ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων αναλύοντας ζεύγη από 10 υποσυλλογές από 500 ομοιόμορφα τυχαία πολύγωνα που κυμαίνονται από 10 ακμές σε 100 ακμές με ένα βήμα μεγέθους 10 ακμών, για τα οποία υπολογίσαμε την μέση τιμή και έπειτα υπολογίσαμε το μέσο των 10 μέσων τιμών για την εκτίμησή μας. Όμοια, αναλύσαμε 10 υποσυλλογές των 500 ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων που κειμαίνονται από 10 ακμές έως 100 ακμές με ένα βήμα μεγέθους 10 ακμών, για τα οποία υπολογίσαμε την μέση τιμή της συστροφής και έπειτα υπολογίσαμε το μέσο των 10 μέσων τιμών για την εκτίμησή μας για τη συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου. Για τον υπολογισμό της αυξητικής τάσης του αριθμού περιέλιξης ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας επίπεδης καμπύλης αναλύσαμε 20 υποσυλλογές από 2500 ομοιόμορφων επίπεδων πολυγώνων που κειμαίνονται από 25 έως 500 ακμές με ένα βήμα μεγέθους 25.

Τέλος, αναλύσαμε ζεύγη από 10 υποσυλλογές από 500 κανονικούς τυχαίους περιπάτους που κειμαίνονται από 10 ακμές έως 100 ακμές με ένα βήμα μεγέθους 10 ακμών, για τα οποία υπολογίσαμε την μέση απόλυτη τιμή του αριθμού πε-

ριέλιξης και μετά υπολογίσαμε τον μέσο των 10 μέσων τιμών για την εκτίμησή μας για την ασυμπτωτική τάση του $\langle ALN \rangle$. Ομοίως, αναλύσαμε 10 υποσυλλογές από 500 κανονικούς τυχαίους περίπατους που κυμαίνονταν από 10 έως 100 ακμές με ένα βήμα μεγέθους 10 ακμών, για τα οποία υπολογίσαμε την μέση τιμή της απόλυτης τιής του αριθμού αυτοπεριέλιξης και μετά υπολογίσαμε το μέσο των 10 μέσων τιμών για την εκτίμησή μας για το $\langle ASL \rangle$.

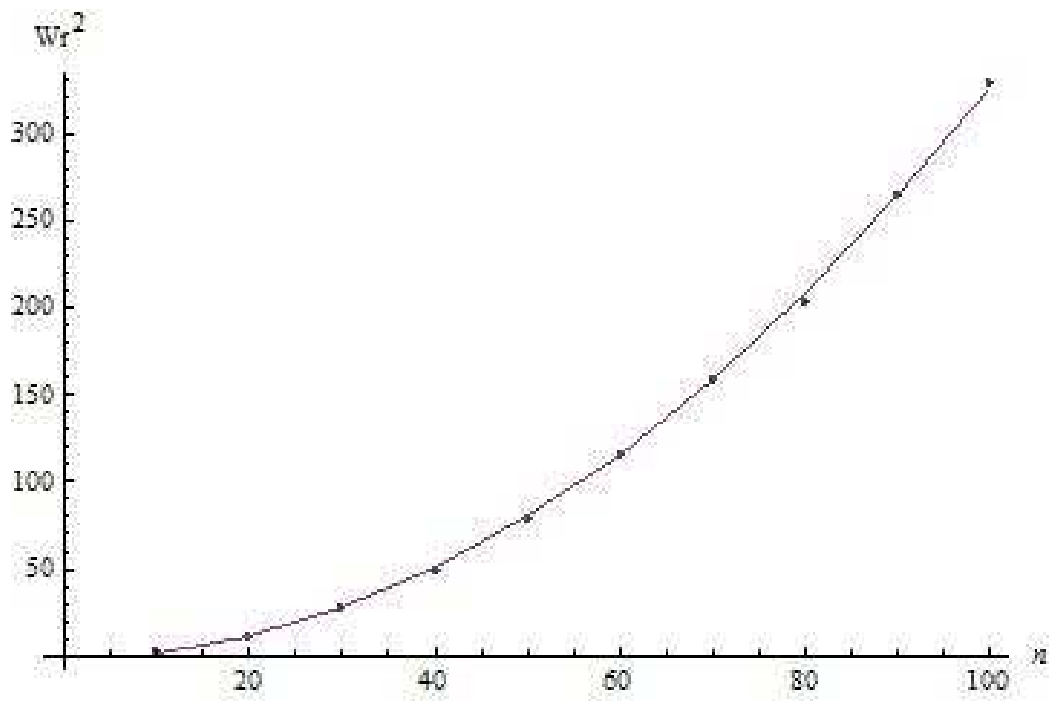
6.1 Μέση τετραγωνική συστροφή και μέση απόλυτη συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου

Η πρώτη μας αριθμητική μελέτη έχει ως αντικείμενο τη συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου. Από το Θεώρημα 5.1.4 τη μέση τετραγωνική συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου αυξάνεται με ένα ρυθμό $E[Wr^2] \sim O(n^2)$. Για να κάνουμε την σύγκριση με αυτό το αναλυτικό αποτέλεσμα υπολογίσαμε τη μέση τετραγωνική συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου μεταβλητού μήκους.

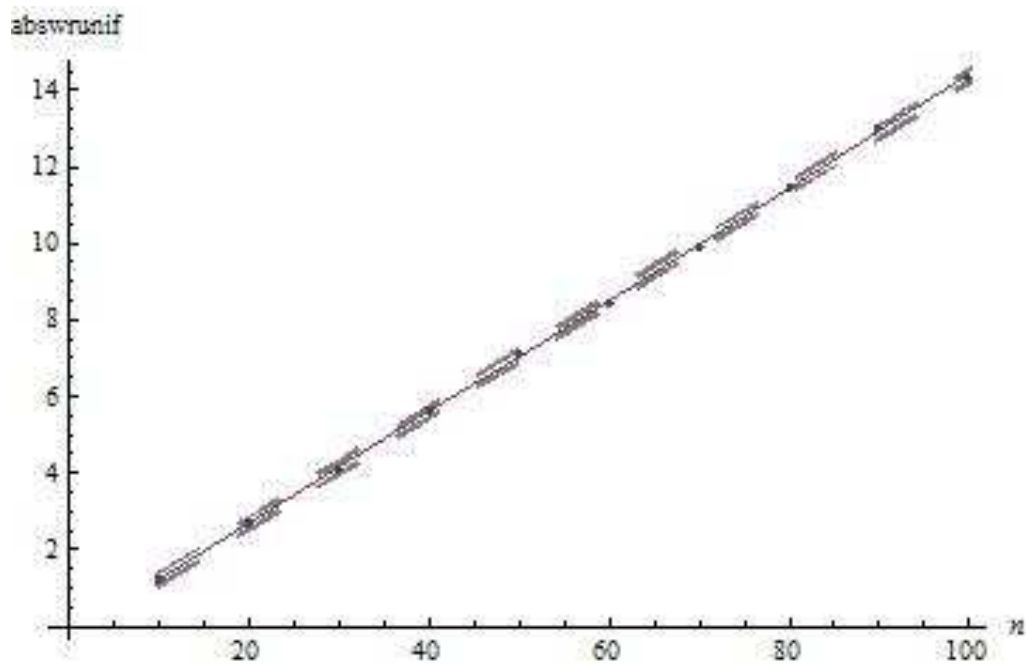
Τα αποτελέσματα φαίνονται στην Εικόνα 6.1. Η καμπύλη στην εικόνα έχει προσαρμοστεί σε μία καμπύλη της μορφής $an^{\frac{1}{2}} + b$ όπου το a εκτιμάται να είναι 0.0328389 και το b εκτιμάται να είναι -2.12928 , με έναν συντελεστή προσδιορισμού $R^2 = 0.9997$. Ο συντελεστής προσδιορισμού παίρνει τιμές μεταξύ 0 και 1, και είναι ένα μέτρο του πόσο καλά η καμπύλη προσαρμόζεται στα δεδομένα. Άρα η εκτίμηση που δόθηκε από το Θεώρημα 5.1.4 υποστηρίζεται ισχυρά από τα δεδομένα.

Συνεχίζουμε περαιτέρω την μελέτη της συστροφής ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και υπολογίζουμε την μέση απόλυτη τιμή της συστροφής του $E[|Wr|]$.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στην Εικόνα 6.2. Η καμπύλη στην εικόνα έχει



Σχήμα 6.1: Η μέση τετραγωνική συστροφή ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων



Σχήμα 6.2: Μέση απόλυτη τιμή της συστροφής ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων

προσαρμοσθεί σε μία καμπύλη της μορφής $a + bn$ όπου το a εκτιμάται να είναι -0.2372 και το b εκτιμάται να είναι 0.146 , με συντελεστή προσδιορισμού $R^2 = 0.9998$.

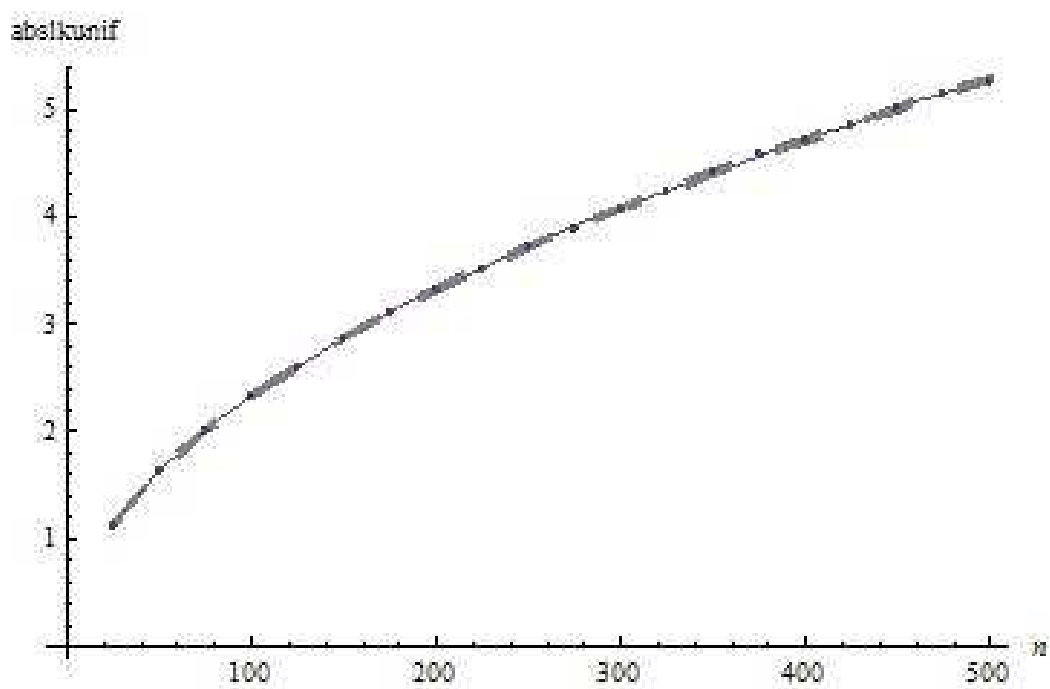
Καθώς ο αριθμός των ακμών των πολυγώνων αυξάνεται, παρατηρούμε μία αύξηση με ρυθμό $O(n)$. Αυτό υποδηλώνει ότι

$$\sqrt{E[W_r^2]} \sim E[\sqrt{W_r^2}] = E[|W_r|]. \quad (6.1)$$

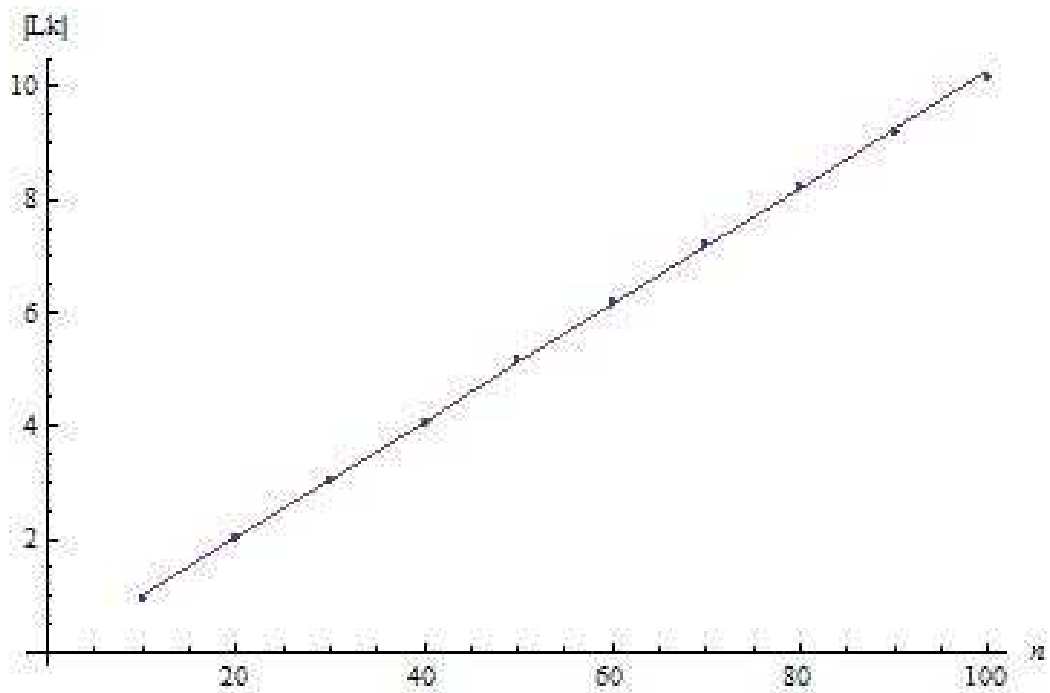
6.2 Μέσος απόλυτος αριθμός περιέλιξης ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο

Η δεύτερη αριθμητική μας μελέτη έχει ως αντικείμενο την διαπλοκή μεταξύ ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας επίπεδης κλειστής καμπύλης. Από το Θεώρημα 5.2.5, η μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας επίπεδης κλειστής καμπύλης σε περιορισμένο χώρο έχει μία αυξητική τάση της μορφής $O(\sqrt{n})$. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων φαίνονται στην Εικόνα 6.3. Τα δεδομένα έχουν προσαρμοστεί σε μία καμπύλη της μορφής $a + b\sqrt{n}$ όπου το a εκτιμήθηκε ίσο με -0.0515 και το b ίσο με 0.2384 , με συντελεστή προσδιορισμού 0.9999 . Έτσι, παρατηρούμε ότι τα αριθμητικά αποτελέσματα επιβεβαιώνουν το Θεώρημα 5.2.5.

Έπειτα εξετάζουμε την διαπλοκή μεταξύ δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων. Από το Θεώρημα 5.1.1, ο μέσος τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης μεταξύ δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων αυξάνει με ρυθμό $O(n^2)$ ως προς τον αριθμό των ακμών των πολυγώνων. Υπολογίσαμε τον μέσο απόλυτο αριθμό περιέλιξης μεταξύ δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στην Εικόνα 6.4. Η καμπύλη της εικόνας έχει προσαρμοστεί σε μία καμπύλη της μορφής $a + bn$ όπου το a εκτιμάται να είναι -0.03 και το b εκτιμάται να είναι 0.103 , με συντελεστή προσδιορισμού $R^2 = 0.9999$. Προφανώς, καθώς ο αριθμός των ακμών αυξάνει, παρατηρούμε μία αύξηση με ρυθμό $O(n)$. Αυτό υπονοεί ότι η αυξητική τάση της απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων είναι ίδια με αυτήν που προβλέψαμε θεωρητικά και επιβεβαιώσαμε αριθμητικά για την αυξητική τάση της απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης μεταξύ μίας απλής κλειστής επίπεδης καμπύλης και ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου. Άρα έχουμε ότι



Σχήμα 6.3: Μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας επίπεδης κλειστής καμπύλης

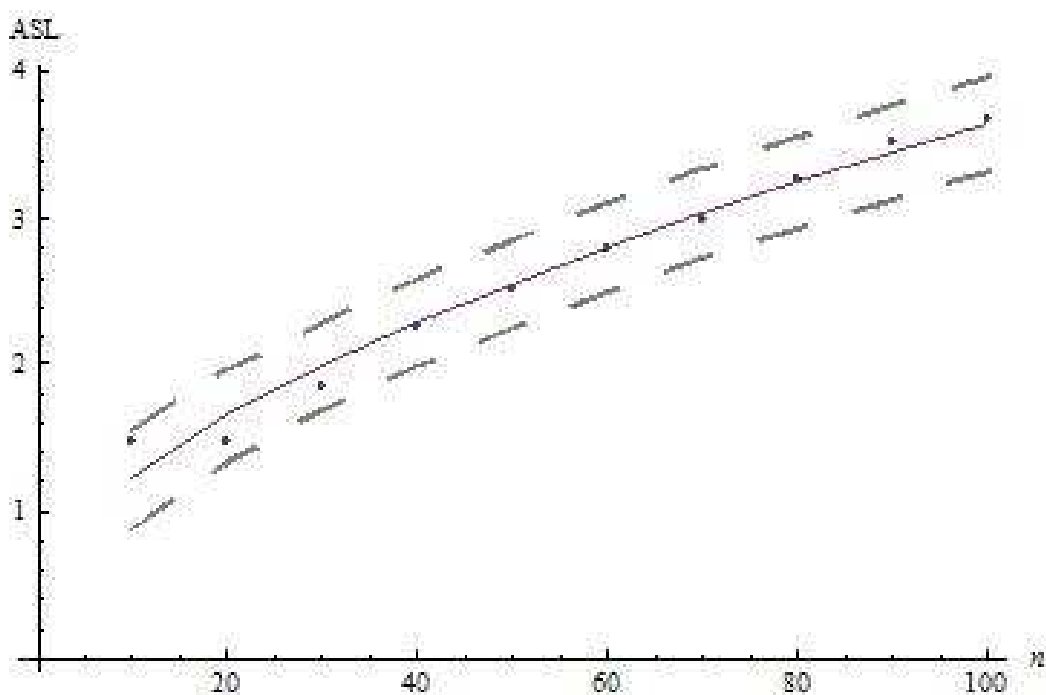


Σχήμα 6.4: Η μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων

$$\sqrt{E[lk^2]} \sim E[\sqrt{lk^2}] = E[|lk|]. \quad (6.2)$$

6.3 Μέση απόλυτη τιμή του αριθμού αυτοπεριέλιξης ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου

Σε αυτή την ενότητα συζητάμε τα αριθμητικά μας αποτελέσματα για την ασυμπτωτική τάση του αριθμού αυτοπεριέλιξης ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου



Σχήμα 6.5: Μέση απόλυτη τιμή της συστροφής ενός τυχαίου κανονικού περιπάτου.

του. Η Εικόνα 6.5 δείχνει τις τιμές του αριθμού αυτοπεριέλιξης $\langle |ASL| \rangle$ που λήφθηκαν από αριθμητικές προσομοιώσεις ιδανικών τυχαίων περιπάτων.

Προηγούμενα αριθμητικά αποτελέσματα [30] υποδηλώνουν ότι η μέση τιμή της απόλυτης συστροφής ενός ιδανικού τυχαίου περιπάτου αυξάνεται σαν \sqrt{n} , όπου n είναι το μήκος του περιπάτου. Έτσι, προσαρμόσαμε τα υπολογιστικά σημεία δεδομένων με την συνάρτηση $b + an^{\frac{1}{2}}$, αφήνοντας τις δύο παραμέτρους a και b ελεύθερες. Τότε το a εκτιμήθηκε ίσο με 0.066 και το b εκτιμήθηκε ίσο με 0.355, με συντελεστή προσδιορισμού $R^2 = 0.9736$. Παρατηρούμε ότι αυτή η καμπύλη περιγράφει αρκετά καλά την αυξητική τάση του $\langle ASL \rangle$ ενός κανονικού περιπάτου αλλά απαιτείται περισσότερη έρευνα για να βρούμε την ακριβή εξάρτηση του αριθμού αυτοπεριέλιξης από το μήκος του περιπάτου.

6.4 Μέσος απόλυτος αριθμός περιέλιξης δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων ίσου βήματος των οποίων τα αρχικά σημεία ταυτίζονται

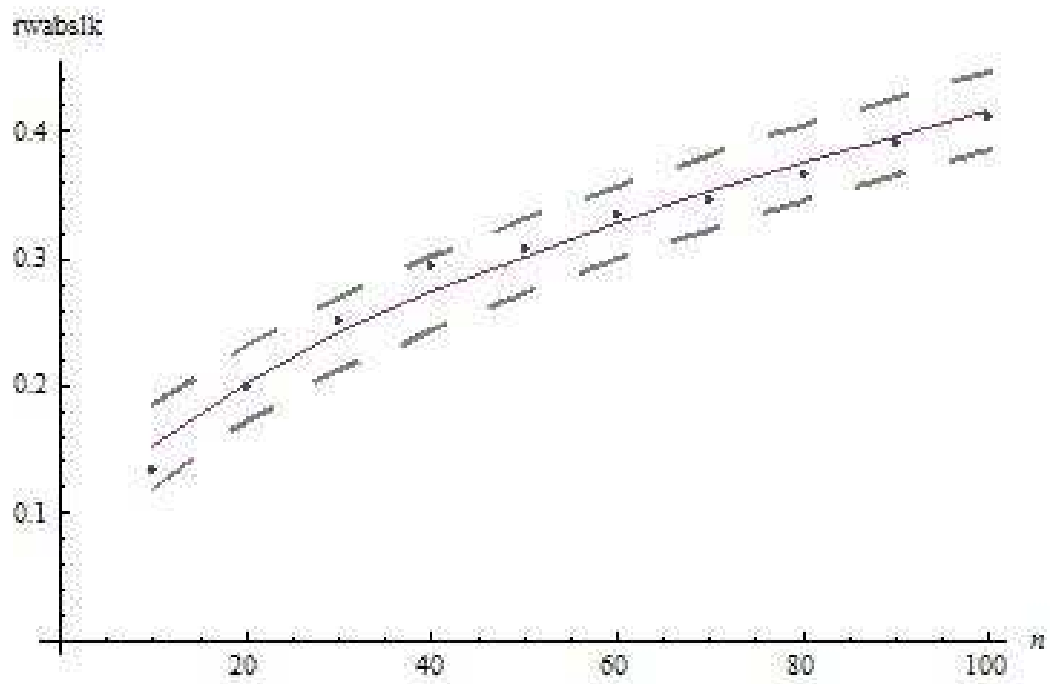
Σε αυτή την ενότητα συζητάμε τα αριθμητικά αποτελέσματα πάνω στην αυξητική τάση του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων των οποίων τα αρχικά σημεία συμπίπτουν. Η Εικόνα 6.6 δείχνει ότι οι τιμές του μέσου απόλυτου αριθμού περιέλιξης $\langle ALN \rangle$ που πήραμε από τις αριθμητικές προσομοιώσεις κανονικών τυχαίων περιπάτων. Από το Θεώρημα 4.3 η μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων τα αρχικά σημεία των οποίων συμπίπτουν, φράσσεται από πάνω από $\langle ALN \rangle \leq \langle ICN \rangle \sim O(n)$, και όπως μπορούμε να δούμε από την Εικόνα 6.6 αυτό επιβεβαιώνεται από τα αριθμητικά μας αποτελέσματα.

Από τα αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν στο [30], περιμένουμε ότι η μέση απόλυτη τιμή της συστροφής ενός προσανατολισμένου κανονικού τυχαίου περιπάτου, X , n βημάτων θα έχει μία εξάρτηση από το μήκος του περιπάτου:

$$\langle AWR \rangle \approx O(\sqrt{n}). \quad (6.3)$$

Έστω $X = (X_0, X_1, \dots, X_n)$ και $Y = (Y_0, Y_1, \dots, Y_n)$ δύο προσανατολισμένοι κανονικοί τυχαίοι περίπατοι μήκους n , τα αρχικά σημεία των οποίων συμπίπτουν, δηλαδή $X_0 = Y_0 = 0$. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την αυξητική τάση του $\langle AWR \rangle$ για να πάρουμε πληροφορία σχετικά με την αυξητική τάση του $\langle ALN \rangle$ ως εξής:

Ορίζουμε $X - Y$ να είναι ο προσανατολισμένος κανονικός τυχαίος περίπατος $2n$ βημάτων, $(Y_n, \dots, Y_1, Y_0 = X_0, X_1, \dots, X_n)$. Η συστροφή του τότε είναι



Σχήμα 6.6: Μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης δύο προσανατολισμένων κανονικών τυχαίων περιπάτων των οποίων τα αρχικά σημεία ταυτίζονται.

$$\begin{aligned}
Wr(X - Y) &= Wr(X) + Wr(-Y) + L(X, -Y) \\
&\Leftrightarrow Wr(X - Y) = Wr(X) + Wr(-Y) - L(X, Y) \\
&\Rightarrow L(X, Y) = -Wr(X - Y) + Wr(X) + Wr(Y) \\
&\Rightarrow |L(X, Y)| \leq |Wr(X - Y)| + |Wr(X)| + |Wr(Y)| \\
&\Rightarrow |L(X, Y)| \leq O(\sqrt{2n}) + O(\sqrt{n}) + O(\sqrt{n}) \\
&\Rightarrow |L(X, Y)| \leq O(\sqrt{n}).
\end{aligned} \tag{6.4}$$

Έτσι αποφασίσαμε να ελέγξουμε εάν η μέση τιμή της απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης μεταξύ των δύο ιδανικών περιπάτων αυξάνει με ρυθμό \sqrt{n} . Προσαρμόσαμε τα δεδομένα που υπολογίσαμε με την συνάρτηση $b + an^{\frac{1}{2}}$, αφήνοντας τις δύο παραμέτρους a και b ελεύθερες. Τότε το a εκτιμήθηκε ίσο με 0.0387 και το b εκτιμήθηκε να είναι 0.0293 με συντελεστή προσδιορισμού 0.9839.

Κεφάλαιο 7

Διαπλοκή Πολυμερικών Τηγμάτων

Ο κύριος στόχος αυτού του κεφαλαίου είναι να ερευνήσουμε νέους τρόπους για να μετρήσουμε το βαθμό της διαπλοκής μίας συλλογής πολυμερικών αλυσίδων. Για αυτόν τον λόγο θα μελετήσουμε k κανονικούς τυχαίους περιπάτους ίσου μήκους των οποίων τα αρχικά σημεία συμπίπτουν.

Έστω A_1, A_2, \dots, A_k να είναι k προσανατολισμένοι κανονικοί τυχαίοι περιπάτοι των οποίων τα αρχικά σημεία συμπίπτουν. Ορίζουμε τον πίνακα περιέλιξης μίας συλλογής προσανατολισμένων τυχαίων περιπάτων ως

$$L = \begin{bmatrix} SL(A_1) & L(A_1, A_2) & \dots & L(A_1, A_k) \\ L(A_2, A_1) & SL(A_2) & \dots & L(A_2, A_k) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L(A_k, A_1) & L(A_k, A_2) & \dots & SL(A_k) \end{bmatrix} \quad (7.1)$$

Προτείνουμε να μετρήσουμε την διαπλοκή της συλλογής των τυχαίων περιπάτων ίσου βήματος χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες του πίνακα περιέλιξης.

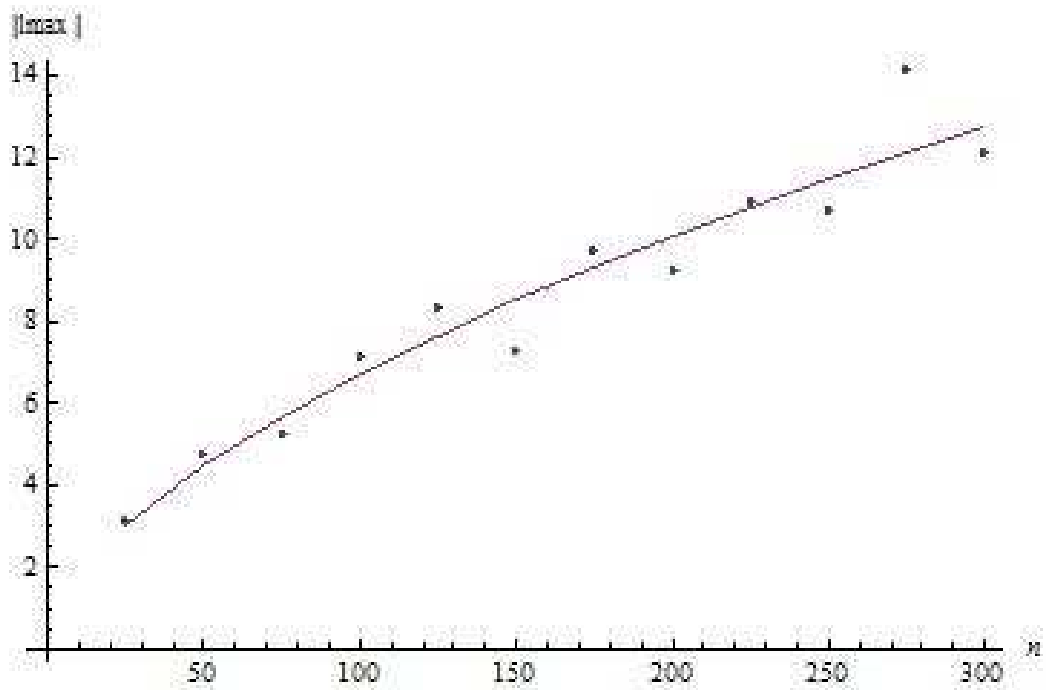
Συμβολίζουμε το σύνολο των αλυσίδων ίσου μήκους, ή κανονικών τυχαίων περιπάτων n βημάτων ως $Eqmc(n)$. Ο πίνακας περιέλιξης k πολυγωνικών

αλυσίδων $L : (Equc(n))^k \rightarrow \mathbb{R}^{k^2}$ είναι μία ομοιόμορφα συνεχής πραγματική συνάρτηση οι τιμές της οποίας είναι πραγματικοί συμμετρικοί $k \times k$ πίνακες. Ως πραγματικοί συμμετρικοί τετραγωνικοί πίνακες αυτοί είναι διαγωνοποιήσιμοι, δηλαδή υπάρχει ένας αντιστρέψιμος πίνακας V που κατασκευάζεται από τα ιδιοδιανύσματα του L σαν κολώνες τέτοιος ώστε $E = V^{-1}LV$, όπου E είναι ένας διαγώνιος πίνακας $E = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ και όπου τα λ_i είναι οι ιδιοτιμές του L . Οι πίνακες E και L σαν όμοιοι πίνακες θα έχουν το ίδιο ίχνος. Το ίχνος του πίνακα E είναι το άθροισμα των ιδιοτιμών του πίνακα L , ενώ το ίχνος του L ισούται με το άθροισμα των αριθμών αυτοπερίελιξης των αλυσίδων που αποτελούν τον πίνακα. Αυτό σημαίνει ότι η αυξητική τάση του αθροίσματος των ιδιοτιμών του L μας δίνει την αυξητική τάση του αθροίσματος των αριθμών αυτοπερίελιξης των αλυσίδων.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η μέγιστη ιδιοτιμή του πίνακα περιέλιξης L . Ο όμοιος πίνακας $E = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ θα εκφράζει την αυξητική τάση της περιέλιξης των αλυσίδων που αποτελούν το τήγμα κατά μήκος των κάθετων αξόνων που ορίζουν τα ιδιοδιανύσματα. Τότε το λ_i θα συμβολίζει την αυξητική τάση στην κατεύθυνση v_i . Μπορούμε να δούμε τον πίνακα E σαν ένα πίνακα μετασχηματισμού. Εφαρμόζοντας επανηλλημένα αυτόν τον μετασχηματισμό κάθε διάνυσμα θα γίνει συγγραμμικό με το ιδιοδιάνυσμα με την μεγαλύτερη ιδιοτιμή.

Για να ελέγξουμε τα παραπάνω, προσομοιώσαμε 3 κανονικούς τυχαίους περιπάτους ίσου μήκους των οποίων τα αρχικά σημεία συμπίπτουν και υπολογίσαμε την μέγιστη κατά απόλυτη τιμή ιδιοτιμή του πίνακα περιέλιξής τους. Το κάναμε αυτό για 20 διαφορετικές 3-άδες κανονικών τυχαίων περιπάτων σε κάθε μήκος και υπολογίσαμε την μέση τιμή τους σαν αποτέλεσμα. Τα μήκη που εξετάσαμε κυμαίνονται από 25 έως 300 ακμές με βήμα 25 ακμών.

Στην Εικόνα 7.1 μπορούμε να δούμε την αυξητική τάση της μέσης τιμής της μεγαλύτερης κατά απόλυτη τιμή ιδιοτιμής του πίνακα περιέλιξης. Τα δεδομένα έχουν προσαρμοστεί σε μία καμπύλη της μορφής $a + b\sqrt{n}$, που είναι



Σχήμα 7.1: Η μέση μέγιστη κατά απόλυτη τιμή ιδιοτιμή του πίνακα περιέλιξης τριών κανονικών τυχαίων περιπάτων με κοινό αρχικό σημείο ως προς το μήκος τους

η τάξη της αυξητικής τάσης της απόλυτης τιμής του αριθμού αυτοπεριέλιξης ενός τυχαίου περιπάτου ίσου βήματος. Το a εκτιμήθηκε ίσο με -1.145 και το b ίσο με 0.795835 με συντελεστή προσδιορισμού 0.925412 . Αυτό το αποτέλεσμα ενισχύει την πρότασή μας ότι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή χαρακτηρίζει τον αριθμό αυτοπεριέλιξης των καμπυλών, παρατηρούμε όμως μία αρκετά μεγάλη απόκλιση των τιμών και είναι απαραίτητη η περεταίρω προσομοίωση τυχαίων περιπάτων για ένα πιο ακριβές αποτέλεσμα.

Θα προσπαθήσουμε να ερμηνεύσουμε την μέγιστη ιδιοτιμή του πίνακα περιέλιξης και το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί σε αυτή σαν ένα συνδυασμό των αλυσίδων που προκαλούν την μεγαλύτερη διαπλοκή του τμήματος.

Έστω ότι τα στοιχεία του \mathbb{R}^k αναπαριστούν αθροίσματα αλυσίδων, τότε τα ιδιοδιανύσματα μπορούν να εκφραστούν σαν $v_i = v_{i1}A_1 + v_{i2}A_2 + \dots + v_{ik}A_k$ για $1 \leq i \leq k$. Έστω $v_m = v_{m1}A_1 + v_{m2}A_2 + \dots + v_{mk}A_k$ το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή με την μεγαλύτερη απόλυτη τιμή, τότε προτείνουμε ότι μία από τις παρακάτω καταστάσεις μπορεί να συμβεί:

(i) εάν $\lambda_{max} \gg \lambda_i \forall j$ και υπάρχει ένας συντελεστής v_{mi} τέτοιος ώστε $v_{mi} \gg v_{mj} \forall 1 \leq j \neq i \leq k$ τότε αυτό σημαίνει ότι ο αριθμός περιέλιξης της αλυσίδας A_i είναι ο πιο σημαντικός παράγοντας διαπλοκής στη διαμόρφωση του τμήματος που μελετάμε.

(ii) εάν υπάρχει μία ιδιοτιμή λ_i τέτοια ώστε $\lambda_{max} > \lambda_i \gg \lambda_j \forall j$ και υπάρχει ένας συντελεστής $v_{m,i}$ τέτοιος ώστε $v_{m,i} \gg v_{m,j} \forall 1 \leq j \neq i \leq k$ και ένας συντελεστής v_{ih} τέτοιος ώστε $v_{ih} \gg v_{i,j} \forall 1 \leq j \neq h \leq k$ τότε $SL_i > SL_h$ και ο αριθμός αυτοπεριέλιξης της i -στής και h -στής αλυσίδας είναι οι πιο σημαντικοί παράγοντες διαπλοκής της συλλογής των αλυσίδων.

Για να ελέγξουμε αυτήν την πρόταση, παράγουμε τρεις κανονικούς τυχαίους περιπάτους τα κέντρα μάζας των οποίων συμπίπτουν και υπολογίζουμε τον πίνακα περιέλιξής τους, τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα.

Παραδείγματα Για τρεις κανονικούς τυχαίους περιπάτους των 100 βη-

μάτων των οποίων τα κέντρα μάζας συμπίπτουν λάβαμε τον παρακάτω πίνακα περιέλιξης.

$$L = \begin{bmatrix} 1.81 & -1.54 & -0.765 \\ -1.54 & -8.98 & -0.89 \\ -0.765 & -0.89 & -2.04 \end{bmatrix} \quad (7.2)$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα περιέλιξης

$\lambda_1 = -9.32989$, $\lambda_2 = 2.12415$, $\lambda_3 = -2.00425$ και τα ιδιοδιανύσματα είναι

$v_1 = \{-0.14477, -0.980231, -0.134865\}$,

$v_2 = \{0.980355, -0.123645, -0.153675\}$

και $v_3 = \{0.133962, -0.154464, 0.978874\}$.

Μπορούμε να δούμε ότι $\lambda_{max} = |\lambda_1| \gg \lambda_2, \lambda_3$. Το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί σε αυτήν την ιδιοτιμή είναι $v_1 = \{-0.14477, -0.980231, -0.134865\}$. Μπορούμε να δούμε ότι $v_{12} = 0.980231 \gg v_{11}, v_{13}$, οπότε ακολουθώντας την παραπάνω μέθοδο θα συμπεραίναμε ότι ο αριθμός αυτοπεριέλιξης της δεύτερης αλυσίδας είναι ο πιο σημαντικός παράγοντας διαπλοκής στη διαμόρφωση του τήγματος που μελετάμε, και αυτό επιβεβαιώνεται κοιτάζοντας τον πίνακα περιέλιξης.

Άλλο ένα ενδιαφέρον παράδειγμα είναι

$$L = \begin{bmatrix} -4.83 & 0.505 & -0.395 \\ 0.505 & -0.24 & -0.575 \\ -0.395 & -0.575 & 3.52 \end{bmatrix} \quad (7.3)$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα περιέλιξης

$\lambda_1 = -4.89801$, $\lambda_2 = 3.63171$, $\lambda_3 = -0.283698$ και τα ιδιοδιανύσματα είναι

$v_1 = \{0.993906, -0.102865, 0.039611\}$,

$v_2 = \{-0.0552282, -0.153722, 0.986569\}$

και $v_3 = \{-0.0953945, -0.982745, -0.158467\}$.

Μπορούμε να δούμε ότι $\lambda_{max} = |\lambda_1| > \lambda_2 \gg \lambda_3$, $v_{11} \gg v_{12}, v_{13}$ και $u_{23} \gg u_{21}, u_{22}$. Ακολουθώντας την παραπάνω μέθοδο θα συμπεραίναμε ότι $SL_1 > SL_3$ και ότι ο αριθμός αυτοπεριέλιξης της πρώτης και της τρίτης αλυσίδας είναι ο πιο σημαντικός παράγοντας διαπλοκής στη διαμόρφωση του τήγματος που μελετάμε. Μπορούμε να δούμε ότι αυτό επιβεβαιώνεται κοιτάζοντας στον πίνακα περιέλιξης.

Κεφάλαιο 8

Συμπεράσματα

Ορίσαμε τον αριθμό περιέλιξης και τη συστροφή για ανοικτές καμπύλες και αποδείξαμε ότι αυτές οι συναρτήσεις είναι ομοιόμορφα συνεχείς ως προς τις συντεταγμένες της καμπύλης, Θεώρημα 3.0.7. Καθώς τα άκρα των καμπύλων έρχονται κοντύτερα ο αριθμός περιέλιξης και η συστροφή των ανοικτών καμπύλων τείνουν να είναι ίσα με τον αριθμό περιέλιξης και τη συστροφή των κλειστών καμπύλων, Πρόταση 3.0.8. Έτσι, ο αριθμός περιέλιξης και η συστροφή των ανοικτών καμπύλων είναι ένα καλό μέτρο της διαπλοκής μεταξύ ανοικτών αλυσίδων και τη διαπλοκή μίας καμπύλης με τον εαυτό της. Αυτό το μέτρο μπορεί να έχει ιδιαίτερη σημασία στην μελέτη των ιδιοτήτων των τμημάτων πολυμερών, όπου η διαπλοκή των μακρομορίων πολυμερών επηρεάζει τις ιδιότητες του τήγματος.

Το Θεώρημα 5.1.1 στο [19] και το Θεώρημα 5.1.4 προβλέπουν μία αυξητική τάση του μέσου τετραγωνικού αριθμού περιέλιξης και της συστροφής των ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων περιορισμένων σε ένα κυρτό σύνολο στον \mathbb{R}^3 , της μορφής $O(n^2)$ που επιβεβαιώνεται από τα αριθμητικά μας αποτελέσματα.

Χρησιμοποιήσαμε αριθμητικές προσομοιώσεις για να δείξουμε ότι η θεωρητικά προβλεπόμενη αυξητική τάση της μέσης απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης ενός ομοιόμορφων τυχαίου πολυγώνου και μίας απλής επίπεδης κλει-

στής καμπύλης που δίνεται από το Θεώρημα 5.2.5 να είναι της τάξης $O(\sqrt{n})$ ισχύει. Τα αριθμητικά αποτελέσματα επιβεβαιώνουν την θεωρητική μας πρόβλεψη, και προτείνουν ότι $\sqrt{E[lk^2]} \sim O(n) \sim E[\sqrt{lk^2}]$. Έχει πολύ ενδιαφέρον να αποδειχθεί αυτό το αποτέλεσμα θεωρητικά.

Τα αποτελέσματά μας μπορούν να εφαρμοστούν σε πολυμερή περιορισμένα σε μικρούς όγκους, τέτοιους όπως τα βιολογικά συστήματα όπου μόρια DNA είναι περιορισμένα σε πολύ μικρούς όγκους.

Οι ιδανικοί τυχαίοι περίπατοι χρησιμοποιούνται για να μοντελοποιήσουμε την συμπεριφορά των πολυμερών υπό θ -συνθήκες. Αναλύσαμε την αυξητική τάση της μέσης τιμής της απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων n βημάτων και την αυτοπεριέλιξη ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου n βημάτων. Μία δυνατότητα για μελλοντική εργασία θα ήταν να αποδείξουμε αυτό το αποτέλεσμα θεωρητικά.

Τέλος, επεκτείναμε την μελέτη του αριθμού περιέλιξης προσανατολισμένων ανοικτών αλυσίδων στην μελέτη συλλογών ανοικτών αλυσίδων τα αρχικά σημεία των οποίων συμπίπτουν. Εισάγαμε ένα νέο μέτρο περιέλιξης, τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα περιέλιξης. Προτείναμε μία μέθοδο για να ερμηνεύσουμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του αριθμού περιέλιξης που μας δίνει πληροφορία για την διαπλοκή ανοικτών αλυσίδων. Θα ήταν πολύ ενδιαφέρον να επεκτείνουμε αυτήν την πρόταση με πιο λεπτομερή συμπεράσματα και την στατιστική μελέτη σε περαιτέρω έρευνα. Οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα συχνά χαρακτηρίζουν τις ιδιότητες πολυμερικών συστημάτων και κανείς μπορεί να φάξει για συνδέσμους αυτών με το του πίνακα περιέλιξης.

Βιβλιογραφία

- [1] M. Rubinstein, R. Colby, *Polymer Physics*, Oxford University Press, 2003.
- [2] P.-G. de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics* Cornell University Press, 1979.
- [3] C. Weber, A. Stasiak, M. Fleurant, P. De Los Rios and G. Dietler 2006 *Gel Electrophoresis of DNA knots in Weak and Strong Electric Fields* Biophys. J. **90**, 3100-3105.
- [4] V. Katritch, J. Bednar, D. Michoud, R. G. Scharein, J. Dubochet and A. Stasiak 1996 *Geometry and physics of knots* Nature **384** 142-5.
- [5] C. Tzoumanekas and D. Theodorou 2006 *Topological Analysis of Linear Polymer Melts: A Statistical Approach* Macromolecules **39** 4592-4604.
- [6] D. Theodorou 2002 *Variable-Connectivity Monte Carlo Algorithms for the Atomistic Simulation of Long-Chain Polymer Systems* P. Nielaba, M. Mareschal, G. Ciccotti (Eds.): LNP 605, pp. 67-127 Springer-Vwelang Berlin Heidelberg.
- [7] P. Pant, D. Theodorou 1995 *Variable Connectivity Method for the Atomistic Monte Carlo Simulation of Polydisperse Polymer Melts* Macromolecules, **28**, 7224-7234.

-
- [8] E. Orlandini, S. G. Whittington 2007 *Statistical topology of closed curves: Some applications in polymer physics* Rev. Mod. Phys. 79, 611-642.
- [9] K. F. Gauss 1877 *Zur mathematischen Theorie der electrodynamischen Wirkungen* Werke Königlischen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, vol.5, 605.
- [10] N. Pippenger 1989 *Knots in Random Walks* Discrete Applied Mathematics **25**,273-278.
- [11] P. Freyd, D. Yetter, J. Hoste, W. Lickorish, K. Millett, A. Ocneanu 1985 Bull. Am. Math. Soc. **12**,239-246.
- [12] P. Plunkett, M. Piatek, A. Dobay, J. Kern, K. Millett, A. Stasiak and E. Rawdon 2007 *Total Curvature and Total Torsion of Knotted Polymers* 10.1021/ma0627673.
- [13] B. Ewing, K. Millett *In Progress in Knot Theory and Related Topics* Herman: Paris,1997; pp 51-68.
- [14] K. Millett 2000 *Knots in Hellas'98 (Delphi) (Series on Knots and Everything)* vol. 24 (Singapore: World Scientific) 306-34.
- [15] K. Millett, A. Dobay, A. Stasiak 2004 *Linear Random Knots and Their Scaling Behavior* Macromolecules 2005 **38** 601-606.
- [16] A. Dobay, J. Dubochet, K. Millett, P. Sottas and A. Stasiak 2003 *Scaling behavior of random knots* Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 100, 5611-5615.
- [17] Y. Diao, A. Dobay, R. B. Kushner, K. Millett and A. Stasiak 2003 *The average crossing number of equilateral random polygons* J.Phys. A. Math. Gen. **36** 11561-74.

-
- [18] Y. Diao, A. Dobay and A. Stasiak 2005 *The average inter-crossing number of equilateral random walks and polygons* J. Phys. A:Math. Gen. **38** 7601-7616.
- [19] J. Arsuaga, T. Blackstone, Y. Diao, E. Karadayi and M. Saito 2007 *The linking of uniform random polygons in confined spaces* J. Phys. A:Math. Theor. **40** 1925-1936.
- [20] J. Arsuaga, T. Blackstone, Y. Diao, K. Hinson, E. Karadayi and M. Saito 3007 *Sampling large random knots in a confined space* J. Phys. A:Math. Theor. **40** 11697-11711.
- [21] M. Brill, P. Diesinger, D. Heermann 2005 *Knots in Macromolecules in Constraint Space* cond-mat/0507020 v1.
- [22] W. F. Pohl 1968 *The Self-Linking Number of a Closed Space Curve* 975-985 J. Math. Mech. vol. 17.
- [23] W. F. Pohl *Some integral formulas for space curves and their generalization.*
- [24] W. F. Pohl 1966 *On a theorem related to the four-vertex theorem* Annals of Mathematics, **84** 356-367.
- [25] T. Banchoff 1974 *Global geometry of polygons, I: The theorem of Fabricius-Bjerre*, Proc. Amer. Math. Soc. **45**, 237-241.
- [26] T. Banchoff 1976 *Self Linking Numbers of Space Polygons* Indiana Univ. Math. J. Vol. 25, No. 12.
- [27] D. Moskvovich 2004 *Framing and the Self-Linking Integral*
- [28] S. F. Edwards 1968 *Statistical mechanics with topological constraints: II*, J. Phys. A(Proc. Phys. Soc.), Ser. 2, Vol. 1.

-
- [29] J. W. Milnor 1965 *Topology from the differentiable viewpoint*, The University Press of Virginia
- [30] E. Orlandini, M. C. Tesi, S. G. Whittington, D.W. Sumners and E. J. Janse van Resburg 1994 *The writhe of a self-avoiding walk* J. Phys. A:Math. Gen. **27** L333-L338.
- [31] V. Katritch, J. Bednar, D. Michoud, R. G. Scharein, J. Dubochet and A. Stasiak 1996 *Geometry and physics of knots* Nature **384** 142-5.
- [32] P. Rogen, H. Bohr 2003 *A new family of global protein shape descriptors* Mathematical Biosciences 182, 167-181.
- [33] K. Klenin, A. Vologodski, V. Anshelevich, A. Dykhne, A. Frank-Kamenetskii, M.D., J. Biomol. Struct. Dyn. 1988, 5, 1173.
- [34] N. Madras and A. D. Sokal, 1988, *The pivot algorithm: A highly efficient Monte Carlo method for the self-avoiding walk* J. Stat. Phys. **50**, 109-186.
- [35] A. Vologodski, S. Levene, K. Klenin, M. Frank-Kamenetskii and N. Cozzarelli 1992 *Conformational and thermodynamic properties of supercoiled DNA* J. Mol. Biol. 227, 1224-1243.
- [36] M. Berger and C. Prior 2006 *The writhe of open and closed curves* J. Phys. A:Math. Gen. **39** 8321-8348.
- [37] K. Klenin, J. Langowski, 2000 *Computation of Writhe in Modelling of Supercoiled DNA* Biopolymers, Vol. 54, 307-317.
- [38] G. Arteca, O. Tapia 2000 *Relative Measure of Geometrical Entanglement to Study Folding-Unfolding Transitions. Application to Analysis of Molecular Dynamics Trajectories of Proteins in vacuo* International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 80, no.4-5, 848-855.

-
- [39] G. Arteca 1997 *Self-similarity in entanglement complexity along the backbones of compact proteins* Phys. Rev. E **56** no.4, 4516-4520.
- [40] P. Rogen and B. Fain 2003 *Automatic classification of protein structure by using Gauss integrals* , Proceedings of the National Academy of Sciences Vol. 100 No. 1 119-124.
- [41] R. Evaers, S. Sukumaran, G. Grest, C. Svaneborg, A. Sivasubramanian, K. Kremer 2004 *Rheology and Microscopic Topology of Entangled Polymeric Liquids* Science, 303, 823-826.
- [42] D. Buck and E. Flapan 2007 *A topological characterization of knots and links arising from site-specific recombination* J. Phys. Math. Theor. **40** 12377-12395.
- [43] M. Tesi, E. Janse van Rensburg, E. Orlandini and S. Whittington 1994 *Knot probability for lattice polygons in confined geometries* J. Phys. A: Math. Gen. **27** 347-360.
- [44] Y. Kantor 2005 *Knots in Polymers* J. of Physics Indian Academy of Sciences Vol. 64, No. 6, 1011-1017.
- [45] Y. Chen 1981 *Monte Carlo study of freely jointed ring polymers I* J. Chem. Phys. **74**, 2034-2038.
- [46] E. Rawdon 1998 *Approximating the thickness of a knot*. Ideal Knots, World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 143-150.
- [47] P. Flory 1969 *Principles of Polymer Chemistry* Cornell University Press, Ithaca, NY.
- [48] M. Freedman, Z. He 1991 *Divergence-Free Fields: Energy and Asymptotic Crossing Number* The Annals of Mathematics, 2nd Ser., Vol. 134, No. 1, 189-229.

- [49] H. Kesten 1963 *On the number of self-avoiding walks* J. Math. Phys. **4**, 960-969.
- [50] L. Rayleigh 1919, Phil. Mag. S. 6 **37**(220), 321-347.
- [51] Y. Diao 1995, *J. Knot Theory Ramifications* **2**(2), 189-196.