



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

**ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΕΤΡΗΣΗ
ΤΗΣ ΔΙΑΠΛΟΚΗΣ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ**

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΕΛΕΝΗΣ ΠΑΝΑΓΙΩΤΟΥ

Διπλωματούχου Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών Ε.Μ.Π.

ΕΠΙΒΛΕΠΟΥΣΑ :

Σ. ΛΑΜΠΡΟΠΟΥΛΟΥ

ΑΝ. ΚΑΘΗΓΗΤΡΙΑ Ε.Μ.Π.

ΑΘΗΝΑ, Σεπτέμβριος 2012



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΕΤΡΗΣΗ
ΤΗΣ ΔΙΑΠΛΟΚΗΣ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΕΛΕΝΗΣ ΠΑΝΑΓΙΩΤΟΥ

Διπλωματούχου Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών Ε.Μ.Π.

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ
ΕΠΙΤΡΟΠΗ :

1. Σ. ΛΑΜΠΡΟΠΟΥΛΟΥ, Αν. Καθ. Ε.Μ.Π. (Επιβλέπουσα)
2. Δ. ΘΕΟΔΩΡΟΥ, Καθ. Ε.Μ.Π.
3. K.C. MILLETT, Prof., U.C.S.B.

ΕΠΤΑΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ
ΕΠΙΤΡΟΠΗ :

1. Σ. ΛΑΜΠΡΟΠΟΥΛΟΥ, Αν. Καθ. Ε.Μ.Π.
2. Δ. ΘΕΟΔΩΡΟΥ, Καθ. Ε.Μ.Π.
3. K.C. MILLETT, Prof., U.C.S.B.
4. Σ. ΑΡΓΥΡΟΣ, Καθ. Ε.Μ.Π.
5. Β. ΜΑΥΡΑΝΤΖΑΣ, Καθ. Πανεπ. Πατρών
6. Ι. ΣΑΡΑΝΤΟΠΟΥΛΟΣ, Καθ. Ε.Μ.Π.
7. Α. ΣΥΜΒΩΝΗΣ, Καθ. Ε.Μ.Π.

ΑΘΗΝΑ, Σεπτέμβριος 2012

Περίληψη

Τα τήγματα πολυμερών είναι πυκνά συστήματα μακρομορίων. Σε τόσο πυκνά συστήματα η ελευθερία των διαμορφώσεων και η κίνηση κάθε πολυμερικής αλυσίδας επηρεάζονται σημαντικά από την διαπλοκή των αλυσίδων, η οποία οφείλεται στο ότι δεν μπορούν να διαπεράσουν η μία την άλλη. Υπό ορισμένες συνθήκες οι πολυμερικές αλυσίδες μπορούν να θεωρηθούν ως ανοικτές ή κλειστές καμπύλες στο χώρο. Το θέμα αυτής της διατριβής είναι η ανάπτυξη και η μελέτη μέτρων διαπλοκής πολυμερικών τμημάτων, χρησιμοποιώντας εργαλεία από την Τοπολογία, συγκεκριμένα από την Θεωρία Κόμβων. Η Θεωρία Κόμβων μελετά απλές κλειστές καμπύλες με στόχο την κατάταξή τους σύμφωνα με την πολυπλοκότητα της διαπλοκής τους.

Στο Κεφάλαιο 1 δίνουμε μία εισαγωγή στην Θεωρία Κόμβων και την Αλγεβρική Τοπολογία με έμφαση στα μαθηματικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται σε αυτή την διατριβή. Πιο συγκεκριμένα, εισάγουμε τις έννοιες: αναλλοίωτες κόμβων (αριθμός περιέλιξης, αριθμός αυτο-περιέλιξης, συστροφή), ομοτοπία, ομολογία, συνομολογία, χώρος επικάλυψης, χειρουργική 3-πολλαπλοτήτων, κοτσίδες.

Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων η διαπλοκή των πολυμερών μπορεί να μετρηθεί μέσω τοπολογικών αναλλοίωτων κόμβων και κρίκων. Στην περίπτωση ανοικτών αλυσίδων οι τοπολογικές αναλλοίωτες κόμβων και κρίκων δεν μπορούν να εφαρμοσθούν. Ένα μέτρο διαπλοκής ανοικτών ή κλειστών πολυμερικών αλυσίδων σε ένα τήγμα είναι το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss, L , που είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη στην περίπτωση των κλειστών αλυσίδων. Ο αριθμός περιέλιξης κατά Gauss είναι το βασικό εργαλείο αυτής της διατριβής. Στο Κεφάλαιο 2 δείχνουμε ότι ο αριθμός περιέλιξης κατά Gauss μπορεί να εφαρμοσθεί σε ανοικτές αλυσίδες για να δώσει ένα μέτρο της πολυπλοκότητάς τους. Στη συνέχεια, χρησιμοποιούμε το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss για να εκτιμήσουμε την αυξητική τάση του μέσου τετραγωνικού αριθμού συστροφής, Wr , (Θεώρημα 2.6.2), του μέσου τετραγωνικού αριθμού περιέλιξης (Θεώρημα 2.6.4), του μέσου τετραγωνικού αριθμού αυτο-περιέλιξης, Sl , (Θεώρημα 2.6.5), και του μέσου απόλυτου αριθμού περιέλιξης (Θεώρημα 2.6.7) ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων σε περιορισμένο χώρο σε σχέση με το μήκος τους, n . Αποδεικνύουμε ότι: $E[Wr^2] \sim E[L^2] \sim E[Sl^2] = O(n^2)$ και $E[|L|] = O(n)$ και τα αριθμητικά μας αποτελέσματα σε τυχαίους περιπάτους επιβεβαιώνουν τις αναλυτικές μας προβλέψεις. Η προσομοίωση πολυμερικών αλυσίδων από ομοιόμορφους τυχαίους περιπάτους είναι ένα απλοποιημένο, αλλά χρήσιμο, μοντέλο για ανοικτές ή κλειστές πολυμερικές αλυσίδες σε

περιορισμένο χώρο.

Η προσομοίωση πολυμερικών τηγμάτων από πιο ρεαλιστικά μοντέλα και η εκτίμηση της διαπλοκής των μοντέλων αυτών είναι δυσκολότερη, αλλά έχει μεγαλύτερο ενδιαφέρον. Για την προσομοίωση ενός τμήματος πολυμερούς συνήθως χρησιμοποιούνται Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες (ΠΣΣ). Με τις ΠΣΣ το πολυμερικό τήγμα παράγεται από ένα κελί προσομοίωσης, το οποίο επαναλαμβάνεται στον χώρο δημιουργώντας ένα άπειρο πλέγμα. Εφαρμόζοντας ένα κλασικό μέτρο διαπλοκής σε ένα σύστημα με ΠΣΣ θα πρέπει να κάνουμε ένα άπειρο (ή πολύ μεγάλο) πλήθος υπολογισμών και, επιπλέον, υπάρχει ένα άπειρο πλήθος αλυσίδων στην ίδια σχετική θέση. Από την άλλη, το κελί προσομοίωσης περιέχει όλη την τοπολογική πληροφορία του άπειρου χώρου, όμως τα τμήματα αλυσίδων που περιέχονται μέσα στο κελί είναι πολύ κοντά σε σχέση με το συνολικό μήκος των πραγματικών αλυσίδων και δεν είναι προφανές πώς σχετίζεται η διαπλοκή τους με την διαπλοκή που παρατηρείται στον συνεχή χώρο του άπειρου συστήματος. Επιπλέον, για να λάβουμε υπόψιν τους μεγαλύτερους βαθμούς διαπλοκής, πρέπει να μελετήσουμε την διαμόρφωση ολόκληρων των αλυσίδων στον συνεχή χώρο.

Στο Κεφάλαιο 3, χρησιμοποιώντας τον αριθμό περιέλιξης κατά Gauss, ορίζουμε ένα νέο μέτρο διαπλοκής για αλυσίδες σε ΠΣΣ, τον *περιοδικό αριθμό περιέλιξης*, LK_P . Μελετάμε τις ιδιότητές του για κλειστές και για ανοικτές αλυσίδες σε συστήματα με ΠΣΣ. Για κλειστές αλυσίδες, δείχνουμε ότι ταυτίζεται με τον αριθμό τομών ενός 2-κυκλήματος και μίας 2-αλυσίδας σε μία 3-πολλαπλότητα (στην περίπτωση μας, στερεός τόρος, πεπαχυμένος τόρος ή 3-τόρος σε μία, δύο ή τρεις ΠΣΣ αντίστοιχα). Για ανοικτές αλυσίδες ο LK_P είναι ένα άπειρο άθροισμα, για το οποίο αποδεικνύουμε ότι συγκλίνει στην περίπτωση συστημάτων με μία, δύο ή τρεις ΠΣΣ αντίστοιχα (Θεωρήματα 3.3.1, 3.3.7 και 3.3.16). Αυτό θα μπορούσε ίσως να θεωρηθεί το κεντρικό αποτέλεσμα αυτής της διατριβής. Ο υπολογισμός του περιοδικού αριθμού περιέλιξης στην περίπτωση ανοικτών αλυσίδων μπορεί να είναι δύσκολος. Για την εφαρμογή στα πολυμερή ορίζουμε και μελετάμε τον *τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης*, LK , και τον *περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού*, LK_C , ως προσεγγίσεις του περιοδικού αριθμού περιέλιξης. Αυτά τα μέτρα μπορούν να υπολογισθούν πολύ εύκολα για ένα τήγμα πολυμερούς. Στη συνέχεια, υπολογίζουμε αυτές τις ποσότητες για δείγματα τηγμάτων Πολυαιθυλενίου (ΠΕ) και συγκρίνουμε την κατανομή του LK πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA, ο οποίος χρησιμοποιείται για να ληφθεί αδροποιημένη πληροφορία σχετικά με την διαπλοκή των πολυμερών. Τα αποτελέσματά μας επιβεβαιώνουν ότι ο αλγόριθμος CReTA διατηρεί την τοπολογική πληροφορία ενός τμήματος.

Η διαπλοκή των τμημάτων πολυμερούς είναι ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων. Τα παραπάνω μέτρα διαπλοκής μετρούν την διαπλοκή ζευγών αλυσίδων ή την αυτο-διαπλοκή μίας αλυσίδας σε ΠΣΣ. Στο Κεφάλαιο 4 χρησιμοποιούμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης για να ορίσουμε ένα μέτρο διαπλοκής για ολόκληρο το τμήμα πολυμερούς, τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης. Μελετάμε τις ιδιότητές του και την εξάρτησή του από το μέγεθος του κελιού προσομοίωσης. Αποδεικνύουμε ότι το άθροισμα των στοιχείων κάθε σειράς του περιοδικού πίνακα περιέλιξης είναι ανεξάρτητο του μεγέθους του κελιού (Θεώρημα 4.1.28). Επίσης, αποδεικνύουμε ότι κάποιες από τις ιδιοτιμές του περιοδικού πίνακα περιέλιξης είναι ανεξάρτητες του μεγέθους του κελιού προσομοίωσης (Θεώρημα 4.1.30). Για να λάβουμε περαιτέρω πληροφορία για την διαπλοκή του συστήματος από τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης, τον συσχετίζουμε με ένα γράφημα και χρησιμοποιούμε εργαλεία της Θεωρίας Γραφημάτων (όπως η σταθερά του Cheeger και η Λαπλασιανή ενός γραφήματος) για να μελετήσουμε την ομοιογένεια της διαπλοκής σε ένα τμήμα. Στη συνέχεια υπολογίζουμε τους πίνακες περιέλιξης διαφόρων συστημάτων τυχαίων περιπάτων και τα αριθμητικά μας αποτελέσματα επιβεβαιώνουν τις προβλέψεις μας, δείχνοντας ότι ο πίνακας περιέλιξης μπορεί να διακρίνει τα μη ομοιογενή συστήματα.

Summary

Polymer melts are dense systems of macromolecules. In such dense systems the conformational freedom and motion of each chain is significantly affected due to the uncrossability of polymer chains which gives rise to *entanglement*. Under certain conditions polymer chains can be viewed as closed or open mathematical curves. The subject of this thesis is the study and the development of topological measures of entanglement in polymer melts using tools mainly from Knot Theory. Knot Theory deals with simple closed curves in space and its aim is to classify them according to their entanglement complexity.

In Chapter 1 we give an introduction to Knot Theory and Algebraic Topology. More precisely, we discuss the notions: knot invariants (linking number, self-linking number, writhe), homotopy, homology, cohomology, covering space, surgery on 3-manifolds, braids.

In this thesis we explore measures of entanglement for open or closed polymer chains in a melt. Our main tool is the Gauss linking integral, L . This is a topological invariant in case of closed chains. In Chapter 2 we show that it can be applied to open chains to give a measure of their complexity. First, we use the Gauss linking integral to estimate the scaling of the mean squared writhe, Wr , and mean absolute linking number of uniform random walks with respect to their length, n . We show that: $E[Wr^2] \sim O(n^2)$ and $E[L^2] = O(n^2)$. Our numerical results on uniform random walks confirm our analytical predictions. Uniform random walks comprise a simplified model for open or closed polymer chains in confined spaces.

Next we focus on realistic samples of polymer melts. For the simulation of a polymer melt Periodic Boundary Conditions (PBC) are used. With the use of PBC, the simulation cell is replicated in space to form an infinite lattice. Applying a traditional measure of entanglement to a system with PBC would imply an infinite (or very large) number of computations. Moreover, there is an infinite number of chains in the same relative position. On the other hand, the simulation cell contains all the entanglement information, but measuring the entanglement of the short arcs that lie inside it is not representative of the entanglement complexity of the global chains created in the continuous space.

In Chapter 3 we define a new measure of entanglement for chains in PBC, the *periodic linking number*, LK_P . We study its properties for closed and open chains

in systems employing PBC. For closed chains, we show that it coincides with the intersection number of a 2-chain and a 2-cycle in a 3-manifold (in our case, solid torus, thickened torus, or 3-torus, according to one, two or three PBC). For open chains, LK_P is an infinite summation for which we prove convergence in case of systems employing one, two or three PBC respectively. This is probably the main result of this study. For the purpose of application to polymers we define the local periodic linking number, LK , and the cell periodic linking number, LK_C as cut-offs of the periodic linking number. We then apply them to samples of Polyethylene melts. We compare the distribution of LK before and after the application of the CReTA algorithm, used to obtain coarse grained information of entanglement in polymers.

The entanglement in polymer melts is a many body problem. The above measures of entanglement measure the pairwise entanglement of chains or the self-entanglement of a chain. In Chapter 4 we use the periodic linking number to define a measure of entanglement of the entire polymer melt, the *periodic linking matrix*. We study its properties and its dependence on the size of the system. We prove that the sum of the elements of each row of the periodic linking matrix are independent of cell size. Also, we prove that some of the eigenvalues of the periodic linking matrix are invariant of cell size. In order to extract further information from the linking matrix we relate it to a weighted graph and use tools from Graph Theory (such as the Cheeger constant and the Laplacian of a graph) to study the homogeneity of entanglement in a melt. We then compute the periodic linking matrices of different systems of random walks. Our numerical results confirm our predictions and show that the linking matrix can measure the homogeneity of the entanglement in a melt.

This research has been co-financed by the European Union (European Social Fund - ESF) and Greek national funds through the Operational Program "Education and Lifelong Learning" of the National Strategic Reference Framework (NSRF) - Research Funding Program: Heracleitus II. Investing in knowledge society through the European Social Fund.



Co-financed by Greece and the European Union

Ευχαριστίες

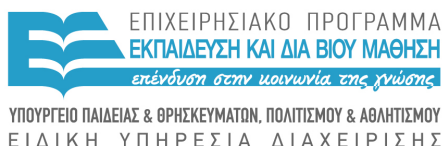
Θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες στην επιβλέπουσα Καθηγήτρια Σοφία Λαμπροπούλου για την πολύ σημαντική και συνεχή καθοδήγησή της, την επίβλεψη και την υποστήριξη που παρείχε σε αυτή την μελέτη. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή Kenneth C. Millett για την σημαντική καθοδήγηση και υποστήριξη αυτής της μελέτης. Θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες στον Καθηγητή Δώρο Ν. Θεοδώρου για την υποστήριξή του και για την έμπνευση που έδωσε η έρευνά του για αυτή την διατριβή.

Επίσης θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς μου ευχαριστίες στον Καθηγητή Σ. Αργυρό, τον Καθηγητή Β. Μαυραντζά, τον Καθηγητή Ι. Σαραντόπουλο και τον Καθηγητή Α. Συμβώνη για τα χρήσιμα σχόλια και παρατηρήσεις που βελτίωσαν αυτή την διατριβή.

Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο - ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) - Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: Ηράκλειτος ΙΙ . Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγικές Έννοιες	13
1.1	Διαγράμματα Κόμβων/Κρίκων και Αναλλοιώτες	13
1.2	Όμοτοπία και Θεμελιώδης Ομάδα	17
1.3	Ομολογία	19
1.4	Συνομολογία	23
1.4.1	Δυϊκός ισομορφισμός Poincaré	25
1.5	Χώροι επικάλυψης	27
1.5.1	Χώροι γινόμενα και χώροι πηλίκα	27
1.5.2	Χώρος επικάλυψης και ολικό κάλυμμα	31
1.6	Χειρουργική	33
1.7	Κοτσίδες	35
2	Διαπλοκή ανοικτών αλυσίδων	37
2.1	Αριθμός περιέλιξης	39
2.2	Μέσος αριθμός διασταυρώσεων	47
2.3	Συστροφή	48
2.4	Αριθμός αυτοπεριέλιξης	49
2.5	Παραμορφώσεις στο χώρο	52
2.6	Ομοιόμορφοι τυχαίοι περίπατοι σε περιορισμένο χώρο	60
2.6.1	Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός συστροφής ενός ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου σε περιορισμένο χώρο	61
2.6.2	Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης δύο ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων σε περιορισμένο χώρο	66
2.6.3	Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός αυτο-περιέλιξης ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου	66
2.6.4	Διαπλοκή μεταξύ μίας προσανατολισμένης καμπύλης και ενός προσανατολισμένου τυχαίου πολυγώνου σε περιορισμένο χώρο	68

2.6.5	Αριθμητικά αποτελέσματα	71
2.6.5.1	Μέση τετραγωνική συστροφή και μέση απόλυτη συστροφή ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου	72
2.6.5.2	Μέσος απόλυτος αριθμός περιέλιξης ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο	73
2.6.5.3	Μέση απόλυτη τιμή του αριθμού αυτοπεριέλιξης ενός κανονικού τυχαίου περιπάτου	75
2.6.5.4	Μέσος απόλυτος αριθμός περιέλιξης δύο κανονικών τυχαίων περιπάτων ίσου βήματος των οποίων τα αρχικά σημεία ταυτίζονται	76
2.7	Συμπεράσματα	78
3	Διαπλοκή σε συστήματα με ΠΣΣ	79
3.1	Συστήματα με ΠΣΣ	80
3.2	Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης, LK_P	82
3.2.1	Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης κλειστών αλυσίδων	85
3.2.1.1	Σύνδεση του LK_P με τον αριθμό περιέλιξης Gauss	85
3.2.2	Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης ανοικτών αλυσίδων	92
3.2.2.1	Αριθμητικές συναρτήσεις	94
3.2.2.2	Το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss για δύο ακμές	97
3.3	Σύγκλιση του LK_P για ανοικτές ελεύθερες αλυσίδες	99
3.3.1	Σύγκλιση σε μία ΠΣΣ	99
3.3.2	Σύγκλιση σε δύο ΠΣΣ	101
3.3.3	Σύγκλιση σε τρεις ΠΣΣ	106
3.3.3.1	Σύγκλιση για μία ειδική διαμόρφωση δύο ελεύθερων αλυσίδων	107
3.3.3.2	Σύγκλιση για κάθε διαμόρφωση δύο ελεύθερων αλυσίδων	115
3.3.4	Αριθμητικά Αποτελέσματα	121
3.4	Ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης, LK	126
3.5	Ο αριθμός περιέλιξης κελιού, LK_C	129
3.6	Εφαρμογή στα πολυμερή	130
3.6.1	Ο αλγόριθμος CReTA	130
3.6.2	Ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης τηγμάτων πολυαιθυλενίου	131
3.6.3	Ο τοπικός περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης τηγμάτων πολυαιθυλενίου	135
3.6.4	Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης κελιού τηγμάτων πολυαιθυλενίου	139
3.7	Συμπεράσματα	143

4 Πίνακας Περιέλιξης	145
4.1 Περιοδικός Πίνακας Περιέλιξης	146
4.1.1 Συστήματα με μία ΠΣΣ	148
4.1.1.1 Μία κλειστή αλυσίδα σε ένα κελί με μία ΠΣΣ	149
4.1.1.2 n κλειστές αλυσίδες σε ένα κελί με μία ΠΣΣ	160
4.1.2 Συστήματα με δύο ή τρεις ΠΣΣ	172
4.1.2.1 Μία κλειστή αλυσίδα σε ένα κελί με δύο ή τρεις ΠΣΣ	173
4.1.2.2 n κλειστές αλυσίδες σε ένα κελί με δύο ή τρεις ΠΣΣ	178
4.2 Γραφήματα πινάκων περιέλιξης	185
4.2.1 Η σταθερά του Cheeger για περιοδικά γραφήματα	187
4.3 Αριθμητικά αποτελέσματα	191
4.3.1 Ανάλυση δεδομένων	194
4.4 Συμπεράσματα	204
5 Συμπεράσματα	205

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγικές Έννοιες από την Θεωρία Κόμβων και την Αλγεβρική Τοπολογία

Σε αυτή την Παράγραφο, δίνουμε μία σύντομη εισαγωγή στην Θεωρία Κόμβων και παραθέτουμε κάποιους βασικούς ορισμούς και αποτελέσματα της Αλγεβρικής Τοπολογίας (τα οποία θα χρησιμοποιηθούν στην Παράγραφο 3.2.1). Πιο συγκεκριμένα, εισάγουμε τις έννοιες: αναλλοίωτη κόμβων (αριθμός περιέλιξης, αριθμός αυτο-περιέλιξης, συστροφή), ομοτοπία, ομολογία, συνομολογία, χώρος επικάλυψης, χειρουργική 3-πολλαπλοτήτων, κοτσίδες.

1.1 Διαγράμματα Κόμβων/Κρίκων και Αναλλοίωτες

Ένας κόμβος είναι μία εμφύτευση ενός κύκλου στον S^3 ή στον \mathbb{R}^3 . Ένας κρίκος με n συνιστώσες είναι μία εμφύτευση n κύκλων στο χώρο. Δίνοντας σε κάθε συνιστώσα έναν προσανατολισμό παίρνουμε έναν προσανατολισμένο κόμβο ή κρίκο. Όπως θα δούμε όλοι οι κόμβοι ή κρίκοι που συναντώνται στις εφαρμογές των πολυμερών έχουν έναν φυσικό προσανατολισμό. Στη συνέχεια θα θεωρούμε ότι όλοι οι κόμβοι ή κρίκοι είναι προσανατολισμένοι.

Δύο κόμβοι (ή κρίκοι) είναι ισοτοπικοί εάν υπάρχει μία συνεχής παραμόρφωση (ομοιομορφισμός) του χώρου που μας πάει από τον έναν στον άλλο. Το κεντρικό πρόβλημα της Θεωρίας Κόμβων είναι να καθορίσουμε εάν δύο κόμβοι είναι ισοτοπικοί ή όχι. Σε κάθε κλάση ισοτοπίας κόμβων ή κρίκων αντιστοιχεί ένας τύπος κόμβου ή κρίκου. Για να ξεχωρίσουμε τους διαφορετι-

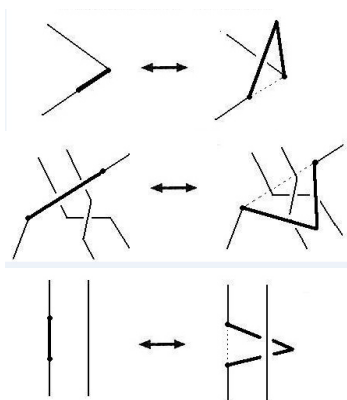
κούς τύπους κόμβων/κρίκων χρησιμοποιούνται *αναλλοίωτες ισοτοπίας*, οι οποίες είναι ιδιότητες οι οποίες παραμένουν αναλλοίωτες υπό ισοτοπικές κινήσεις του κόμβου/κρίκου.

Οι κόμβοι και οι κρίκοι μπορεί να κείτονται σε άλλες 3–πολλαπλότητες, διαφορετικές του S^3 ή του \mathbb{R}^3 : Μία n –*πολλαπλότητα* είναι ένας χώρος Hausdorff τέτοιος ώστε κάθε σημείο $x \in M^n$ έχει μία γειτονιά ομοιομορφική με τον \mathbb{R}^n .

Για την μελέτη των κόμβων και κρίκων, θεωρητικές (μέσω της αλγεβρικής τοπολογίας) και συνδυαστικές μέθοδοι (μέσω διαγραμμάτων κόμβων/κρίκων) χρησιμοποιούνται και συνδυάζονται για να ξεχωρίσουμε τους διαφορετικούς τύπους κόμβων και κρίκων.

Ένας τρόπος να μελετήσουμε κόμβους ή κρίκους στον S^3 ή τον \mathbb{R}^3 έγγειται στο να τα προβάλλουμε σε ένα επίπεδο. Μία προβολή λέγεται *γενική* εάν υπάρχουν μόνο πεπερασμένα πολλαπλά σημεία και όλα τα πολλαπλά σημεία είναι *διπλά σημεία*. Ένα *διάγραμμα κόμβου ή κρίκου* είναι μία γενική προβολή ενός κόμβου ή κρίκου αντίστοιχα σε ένα επίπεδο.

Δύο κόμβοι ή κρίκοι είναι *ισοδύναμοι* εάν δύο οποιαδήποτε διαγράμματά τους είναι *ισοδύναμα* μέσω μίας ακολουθίας κινήσεων *Reidemeister* (δείτε Εικόνα 1.1) [116]. Μία *αναλλοίωτη ισοτοπία* ενός διαγράμματος κόμβου ή κρίκου είναι μία ιδιότητα του διαγράμματος που παραμένει αναλλοίωτη υπό κινήσεις Reidemeister. Στη συνέχεια θα μελετήσουμε κάποιες αναλλοίωτες κόμβων και κρίκων.



Σχήμα 1.1: Οι κινήσεις Ρειδεμειστερ.

Ο αριθμός διασταυρώσεων

Το απλούστερο μέτρο που είναι ενδεικτικό της πολυπλοκότητας ενός κόμβου και που μπορεί να υπολογισθεί από ένα διάγραμμα κόμβου ή κρίκου είναι ο αριθμός διασταυρώσεων στο διάγραμμα. Φυσικά, αυτό δεν είναι αναλλοίωτη ισοτοπίας, αφού, εάν επιλέξουμε μία άλλη κατεύθυνση προβολής, ο αριθμός των διασταυρώσεων μπορεί να αλλάξει. Ο ελάχιστος αριθμός



Σχήμα 1.2: (α) +1 διασταύρωση και (β) -1 διασταύρωση

διασταυρώσεων ως προς όλες τις διαμορφώσεις ενός κόμβου και ως προς όλες τις δυνατές κατευθύνσεις προβολής, ονομάζεται ο *αριθμός διασταυρώσεων* $c(K)$, είναι μία αναλλοίωτη ισοτοπίας. Παρ'ότι ο $c(K)$ είναι ένα μέτρο που ορίζεται εύκολα, ο υπολογισμός του για έναν κόμβο μπορεί να είναι πάρα πολύ δύσκολος. Πράγματι, το να αποφασίσουμε εάν ένα διάγραμμα αναπαριστά τον τετριμμένο κόμβο είναι ένα πολύ δύσκολο αλογοριθμικό πρόβλημα [52].

Ο αριθμός περιέλιξης

Τα διαγράμματα κόμβων ή κρίκων κληρονομούν τον προσανατολισμό του αντίστοιχου κόμβου ή κρίκου, οπότε θα θεωρούμε *προσανατολισμένα διαγράμματα κόμβων/κρίκων*. Σε ένα προσανατολισμένο διάγραμμα κόμβου ή κρίκου, κάθε διασταύρωση είναι ενός τύπου από αυτούς που φαίνονται στην Εικόνα 2.1. Από σύμβαση, ο αλγεβρικός αριθμός διασταυρώσεων είναι +1 για μία διασταύρωση του πρώτου τύπου και -1 για μία διασταύρωση του δεύτερου τύπου.

Ο *αριθμός περιέλιξης* δύο προσανατολισμένων απλών κλειστών καμπύλων χωρίς διασταυρώσεις ισούται με το μισό αλγεβρικό άθροισμα των διασταυρώσεων μεταξύ των δύο προβεβλημένων καμπυλών σε οποιαδήποτε κατεύθυνση προβολής. Κανείς μπορεί να εύκολα να επιβεβαιώσει ότι αυτό είναι μία αναλλοίωτη των καμπύλων στις κινήσεις Reidemeister. Ο αριθμός περιέλιξης δύο προσανατολισμένων κλειστών καμπυλών είχε οριστεί αρχικά από τον Gauss [46] μέσω ενός ολοκληρώματος που μετρά τον αλγεβρικό βαθμό κατά τον οποίο μία καμπύλη περιστρέφεται γύρω από την άλλη:

Ορισμός 1.1.1. [Gauss 1877] Ο *αριθμός περιέλιξης* κατά Gauss δύο προσανατολισμένων καμπυλών l_1 και l_2 , των οποίων η παραμετρικοποίηση κατά μήκος είναι $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ αντίστοιχα, ορίζεται σαν ένα διπλό ολοκλήρωμα πάνω από τις l_1 και l_2 :

$$L(l_1, l_2) = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds \quad (1.1)$$

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

Ένα σημαντικό μεινέκτημα του αριθμού περιέλιξης είναι ότι πρόκειται για μία ασθενής τοπολογική αναλλοίωτη. Δεν μπορεί να ξεχωρίσει ακόμα και απλούς τύπους κρίκων. Ο κρίκος Whitehead και οι κρίκοι Borromean είναι παραδείγματα για τα οποία ο αριθμός περιέλιξης είναι

μηδέν (όπως για τον τετριμμένο κρίκο), ενώ αυτοί είναι τοπολογικά πεπλεγμένοι, δείτε Εικόνα 1.3.



Σχήμα 1.3: $L = 0$ για τον κρίκο whitehead.

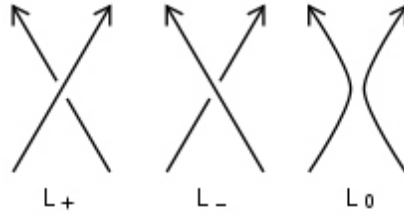
Παρ' όλ' αυτά, ο αριθμός περιέλιξης είναι ένα θεμελιώδες εργαλείο στην ανάπτυξη πιο ευαίσθητων τοπολογικών αναλλοίωτων κόμβων και κρίκων. Για παράδειγμα, μπορεί να χρησιμοποιηθεί, έμμεσα μέσω του άπειρου καλύμματος του συμπληρώματος του κρίκου, για να δείξει ότι ο κρίκος Whitehead είναι μη τετριμμένος. Είναι επίσης ουσιαστικό στον ορισμό του πολυωνύμου του Alexander ενός κόμβου ή κρίκου, μία τοπολογική αναλλοίωτη που θα συζητήσουμε στην συνέχεια.

Πολύωνυμα Κόμβων/Κρίκων

Ένα πολύωνυμο κόμβων είναι μία απεικόνιση από ένα διάγραμμα κόμβου σε έναν δακτύλιο πολυωνύμων Laurent, το οποίο είναι αναλλοίωτο υπό κινήσεις Reidemeister. Χρησιμοποιώντας το άπειρο κυκλικό κάλυμμα του συμπληρώματος ενός κόμβου και τον αριθμό περιέλιξης, το 1928 ο Alexander όρισε ένα πεπερασμένο ακέραιο πολυώνυμο Laurent για έναν τοπολογικό τύπο κόμβου, το πολυώνυμο Alexander, το οποίο έχει μελετηθεί και εφαρμοσθεί εκτενώς από τότε που ανακαλύφθηκε [2]. Το 1969, ο Conway βρήκε έναν τρόπο υπολογισμού του πολυωνύμου Alexander ενός κρίκου χρησιμοποιώντας την επονομαζόμενη σχέση *skein*. Αυτή είναι μία γενικά γραμμική σχέση μεταξύ των πολυωνύμων Alexander διαγραμμάτων κόμβων που διαφέρουν μόνο τοπικά. Πιο συγκεκριμένα, συσχετίζει το πολυώνυμο ενός διαγράμματος κρίκου με τα πολυώνυμα διαγραμμάτων κρίκων που δημιουργούνται αλλάζοντας μία δασταύρωση του αρχικού διαγράμματος, δείτε Εικόνα 1.4.

Το 1984, χρησιμοποιώντας μεθόδους από τις άλγεβρες von Neumann, ο Jones δημιούργησε μία αναπαράσταση της ομάδας κοτσίδων που του επέτρεψε να ορίσει ένα άλλο πολυώνυμο κόμβων το οποίο αποδείχθηκε ότι είναι μία πολύ πιο δυνατή αναλλοίωτη κόμβων και κρίκων [64, 63]. Το 1985 το πολυώνυμο Alexander και το πολυώνυμο Jones αυτό γενικεύθηκε στο πολυώνυμο HOMFLYPT δύο μεταβλητών [44, 107, 39]. Ο Kauffman ανακάλυψε μία θεμελιώδη

κατασκευή σαν το πολυώνυμο Jones και άλλο ένα, ανεξάρτητο, πολυώνυμο δύο μεταβλητών [67]. Αυτή η μελέτη ενέπνευσε μία συνεχιζόμενη εξέλιξη όλο και δυνατότερων αναλλοίωτων.



Σχήμα 1.4: Τα πολυώνυμα Alexander, Jones και HOMFLYPT υπολογίζονται από ένα διάγραμμα κόμβου ή κρίκου χρησιμοποιώντας τις σχέσεις *skein*. Για το πολυώνυμο Jones: $(t^{1/2} - t^{-1/2})V(L_0) = t^{-1}V(L_+) - tV(L_-)$. Για το πολυώνυμο HOMFLYPT: $lP(L_+) + l^{-1}P(L_-) + mP(L_0) = 0$.

Αν και πρόκειται για αυξανόμενα δυνατές αναλλοίωτες, υπάρχουν μή ισοδύναμοι κόμβοι ή κρίκοι για τους οποίους δίνουν την ίδια τιμή. Όμως γενικά, αυτές οι αναλλοίωτες είναι ικανές να προσδιορίσουν πιστά τους τύπους κόμβων που συναντώνται στις προσομοιώσεις πολυμερών.

Ο υπολογισμός ενός πολυωνύμου κόμβων ή κρίκων χρειάζεται πολυωνυμικό χρόνο στην χειρότερη περίπτωση. Παρ' όλ' αυτά, αυτό δεν είναι ένα μειονέκτημα για την εφαρμογή τους σε πραγματικά συστήματα, αφού οι διαμορφώσεις που λαμβάνουν συνήθως τα πολυμερή είναι πολύ πιο απλές.

1.2 Όμοτοπία και Θεμελιώδης Ομάδα

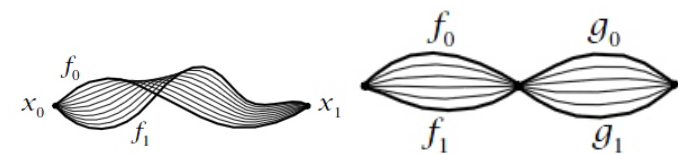
Ορισμός 1.2.1. Εάν (X, T_X) και (Y, T_Y) είναι τοπολογικοί χώροι, μία συνάρτηση $h : X \rightarrow Y$ είναι ένας ομοιομορφισμός εάν και μόνο αν

1. h είναι 1-1 και επί
2. $U \in T_X$ αν και μόνο αν $h(U) \in T_Y$ (h, h^{-1} συνεχής).

Ένα μονοπάτι στον χώρο X είναι μία συνεχής απεικόνιση $f : I \rightarrow X$ όπου $I = [0, 1]$. Τα σημεία $f(0)$ και $f(1)$ ονομάζονται τα αρχικά και τελικά σημεία του μονοπατιού αντίστοιχα. Παρατηρείστε ότι αν f^{-1} ορίζεται ως $f^{-1}(t) = f(1-t)$, $t \in I$, τότε f^{-1} είναι ένα μονοπάτι στον X που ενώνει το $f(1)$ με το $f(0)$. Ένας κόμβος είναι ένα μονοπάτι για το οποίο $f(0) = f(1)$, δηλαδή μία κλειστή καμπύλη, τέτοια ώστε $f(x_1) \neq f(x_2) \forall x_1, x_2 \in (0, 1)$. Μία συνεχής παραμόρφωση ενός μονοπατιού ορίζεται ως εξής:

Ορισμός 1.2.2. Μία ομοτοπία μεταξύ δύο μονοπατιών είναι μία οικογένεια $f_t : I \rightarrow X, 0 \leq t \leq 1$, τέτοια ώστε

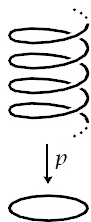
- (1) τα σημεία $f_t(0) = x_0$ και $f_t(1) = x_1$ είναι ανεξάρτητα του t ,
- (2) η αντίστοιχη απεικόνιση $F : I \times I \rightarrow X$ ορίζεται ως $F(s, t) = f_t(s)$ είναι συνεχής. Τότε τα δύο μονοπάτια λέγονται ομοτοπικά, $f_0 \sim f_1$.



Σχήμα 1.5: a) Ομοτοπία. b) Η σύνθεση μονοπατιών σέβεται τις κλάσεις ομοτοπίας.

Η ομοτοπία είναι σχέση ισοδυναμίας. Δοθέντων δύο μονοπατιών $f, g : I \rightarrow X$ τέτοια ώστε $f(1) = g(0)$, υπάρχει μία σύνθεση, που ορίζεται ως: $f \cdot g(s) = f(s)$, εάν $0 \leq s \leq 1/2$ ή $= g(2s - 1)$ εάν $1/2 \leq s \leq 1$. Αυτή η πράξη σέβεται τις κλάσεις ομοτοπίας (δείτε Εικόνα 1.5). Εάν περιορίσουμε την προσοχή μας σε κλειστές καμπύλες που έχουν το αρχικό και τελικό σημείο ταυτίζεται και λέγεται *σημείο βάσης*, τότε το σύνολο των κλάσεων ομοτοπίας $[f]$ των καμπύλων $f : I \rightarrow X$ στο σημείο βάσης x_0 είναι μία ομάδα με την σχέση ισοδυναμίας \sim , η θεμελιώδη ομάδα του X στο σημείο x_0 , και συμβολίζεται ως $\pi_1(X, x_0)$.

Παράδειγμα 1: Η θεμελιώδης ομάδα του κύκλου $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$ (δείτε Εικόνα 1.16).



Σχήμα 1.6: Η θεμελιώδης ομάδα του κύκλου, $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$. Η απεικόνιση $\Phi : \mathbb{Z} \rightarrow \pi_1(S^1)$ που στέλνει έναν ακέραιο n στην κλάση ομοτοπίας της κλειστής καμπύλης $\omega_n(s) = (\cos 2\pi ns, \sin 2\pi ns)$ με βάση το $(1, 0)$ είναι ένας ισομορφισμός.

Παράδειγμα 2: Έστω \mathbb{R}^n ο Ευκλείδειος n -χώρος. Τότε η $\pi_1(\mathbb{R}^n, x_0)$ είναι η τετριμμένη ομάδα (η ομάδα που περιέχει μόνο το ταυτοτικό στοιχείο). Εάν f είναι μία κλειστή καμπύλη

στον \mathbb{R}^n με βάση το x_0 , η ομοτοπία ευθείας γραμμής είναι ένα μονοπάτι ομοτοπίας μεταξύ της f και του σταθερού μονοπατιού στο x_0 (η γραμμική ομοτοπία $f_t(s) = (1-t)f_0(s) + tf_1(s)$). Πιο γενικά, εάν X είναι ένα οποιοδήποτε κυρτό υποσύνολο του \mathbb{R}^n , τότε $\pi_1(X, x_0)$ είναι η τετριμμένη ομάδα. Πιο συγκεκριμένα, η μοναδιαία μπάλα B^n στον \mathbb{R}^n έχει τετριμμένη θεμελειώδη ομάδα.

Έστω $\phi : X \rightarrow Y$ μία απεικόνιση που στέλνει το σημείο $x_0 \in X$ στο σημείο $y_0 \in Y$. Τότε η ϕ επάγει έναν ομομορφισμό $\phi_* : \pi_1(X, x_0) \rightarrow \pi_1(Y, y_0)$, που ορίζεται συνθέτοντας καμπύλες με βάση το x_0 με την ϕ , δηλαδή, $\phi_*[f] = [\phi f]$. Αυτό το μονοπάτι είναι καλά ορισμένο και είναι ένας ομομορφισμός. Οι επαγόμενοι ομομορφισμοί επιτρέπουν οι σχέσεις μεταξύ των χώρων να γίνουν σχέσεις μεταξύ των θεμελειώδων ομάδων τους:

Πρόταση 1.2.3. *Εάν $\phi : X \rightarrow Y$ είναι μία ισοδυναμία ομοτοπίας, τότε ο επαγόμενος ομομορφισμός $\phi_* : \pi_1(X, x_0) \rightarrow \pi_1(Y, \phi(x_0))$ είναι ένας ισομορφισμός για κάθε $x_0 \in X$*

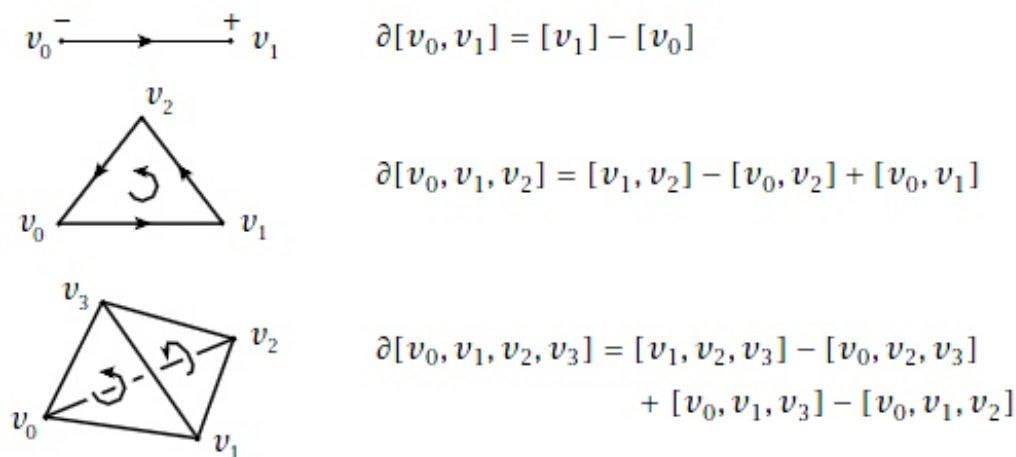
Ένας άλλος τρόπος για να μελετηθούν οι κόμβοι είναι να μελετηθούν τα συμπληρώματά τους: Εάν K_1, K_2 είναι ισοτοπικοί κόμβοι έχουμε έναν ομομορφισμό $h : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ τέτοιον ώστε $h(K_1) = K_2$. Περιορίζοντας την h στο $\mathbb{R}^3 \setminus K_1$ δίνει έναν ομομορφισμό του $\mathbb{R}^3 \setminus K_1$ με τον $\mathbb{R}^3 \setminus K_2$ (δηλαδή, ισοτοπικοί κόμβοι έχουν ομομορφικά συμπληρώματα). Η $\pi_1(\mathbb{R}^3 \setminus K)$ λέγεται ομάδα του κόμβου. Ισοτοπικοί κόμβοι έχουν την ίδια ομάδα κόμβου: Εάν $K_1 \sim K_2$ τότε $\pi_1(\mathbb{R}^3 \setminus K_1) \sim \pi_1(\mathbb{R}^3 \setminus K_2)$. Όμως είναι αλήθεια ότι μη ισοτοπικοί κόμβοι μπορεί να έχουν την ίδια ομάδα κόμβου.

Η θεμελειώδης ομάδα $\pi_1(X)$ είναι ιδιαίτερα χρήσιμη όταν μελετώνται χώροι χαμηλής διάστασης, όπως θα περίμενε κανείς από τον ορισμό τους, ο οποίος χρησιμοποιεί απεικονίσεις μόνο από χώρους χαμηλών διαστάσεων στον X , δηλαδή καμπύλες $I \rightarrow X$, και ομοτοπίες καμπυλών, δηλαδή απεικονίσεις $I \times I \rightarrow X$. Καθώς η θεμελειώδης ομάδα χαρακτηρίζει τις χαμηλές διαστάσεις δεν περιμένουμε να είναι πολύ εκλεπτισμένο εργαλείο για χώρους υψηλών διαστάσεων (δεν μπορεί να ξεχωρίσει τις σφαίρες $S^n, n \geq 2$). Αυτός ο περιορισμός σε χαμηλές διαστάσεις μπορεί να αποκλειστεί θεωρώντας τις αντίστοιχες ομάδες υψηλών διαστάσεων της $\pi_1(X)$. Όμως αυτές έχουν το μειονέκτημα ότι είναι πολύ δύσκολα υπολογίσιμες. Για αυτόν τον λόγο η ομολογία και η συνολογία χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό ομάδων ομοτοπίας.

1.3 Ομολογία

Θα περιγράψουμε μία συνδυαστική προσέγγιση της τοπολογίας που βασίζεται στον διαχωρισμό του χώρου σε δομικά στοιχεία (επονομαζόμενα κελιά συγκεντρωμένα σε συμπλοκα) και τότε μελετώνται αυτά και ο τρόπος με τον οποίο συγκολλώνται για να διαμορφώσουν τον χώρο.

Ένα n -σύμπλοκο ορίζεται σαν το μικρότερο κυρτό σύνολο στον Ευκλείδειο χώρο \mathbb{R}^m που περιέχει $n + 1$ σημεία v_0, \dots, v_n που δεν κείτονται σε μία υπερεπιφάνεια διάστασης μικρότερης από n . Δηλαδή, ένα σημείο x ανήκει σε ένα n -σύμπλοκο αν και μόνο αν $x = \lambda_0 v_0 + \dots + \lambda_n v_n$, όπου $\lambda_i > 0$ και $\sum \lambda_i = 1$. Μία ισοδύναμη συνθήκη θα ήταν ότι τα διανύσματα διαφορών $v_1 - v_0, \dots, v_n - v_0$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα (δείτε Εικόνα 1.7). Τα σημεία v_i είναι οι κορυφές του συμπλόκου, και ένα n -σύμπλοκο συμβολίζεται ως $\langle v_0, \dots, v_n \rangle$. Εάν σβήσουμε μία από τις $n + 1$ κορυφές ενός n -συμπλόκου, έστω την k -στή κορυφή, τότε οι υπόλοιπες n κορυφές παράγουν ένα $(n - 1)$ -σύμπλοκο, το οποίο συμβολίζουμε $\langle v_0, \dots, \bar{v}_k, \dots, v_n \rangle$, και ονομάζεται μία έδρα του $\langle v_0, \dots, v_n \rangle$.

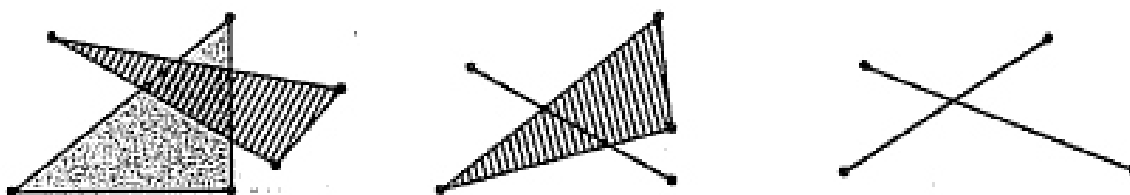


Σχήμα 1.7: Έστω v_0, v_1, \dots, v_k σημεία του Ευκλείδειου n -χώρου E^n σε γενική θέση. Το μικρότερο κυρτό σύνολο που τα περιέχει είναι ένα σύμπλοκο διάστασης k . Συμβολίζουμε $\langle v_0 \rangle$ την κορυφή ή το 0-σύμπλοκο v_0 . $\langle v_0, v_1 \rangle$ είναι η ακμή ή το 1-σύμπλοκο από το v_0 στο v_1 . $\langle v_0, v_1, v_2 \rangle$ είναι το 2-σύμπλοκο με κορυφές τις v_0, v_1, v_2 με τον προσανατολισμό που ορίζει η σειρά τους. Ένα 3-σύμπλοκο $\langle v_0, v_1, v_2, v_3 \rangle$ έχει τον προσανατολισμό μίας έλικας ή μίας βίδας που ορίζεται από τις άλλες ακμές.

Για να θυμόμαστε πώς κολλώνται αυτά τα σύμπλοκα για να διαμορφώσουν τον χώρο, πρέπει να τους δώσουμε έναν προσανατολισμό. Μία ακμή έχει έναν φυσικό προσανατολισμό: από το αρχικό στο τελικό σημείο. δείχνουμε τον προσανατολισμό με ένα βέλος, δείτε Εικόνα 1.7. Προσανατολισμός μπορεί να δοθεί και σε 2-σύμπλοκα, δείτε Εικόνα 1.7. Αλλάζοντας τη σειρά των κορυφών μπορούμε να αλλάξουμε τον προσανατολισμό του συμπλόκου. Γενικά $-\langle v_0, \dots, v_n \rangle = \langle v_1, \dots, v_n \rangle$.

Έστω X Ένας χώρος, η απεικόνιση $\sigma_a : \Delta^n \rightarrow X$ ονομάζεται ένα μοναδικό n -σύμπλοκο. Μία δομή Δ -συμπλόκων σε έναν χώρο X είναι μία συλλογή απεικονίσεων $\sigma_a : \Delta^n \rightarrow X$, με n που εξαρτώνται από τον δείκτη a , τέτοιες ώστε:

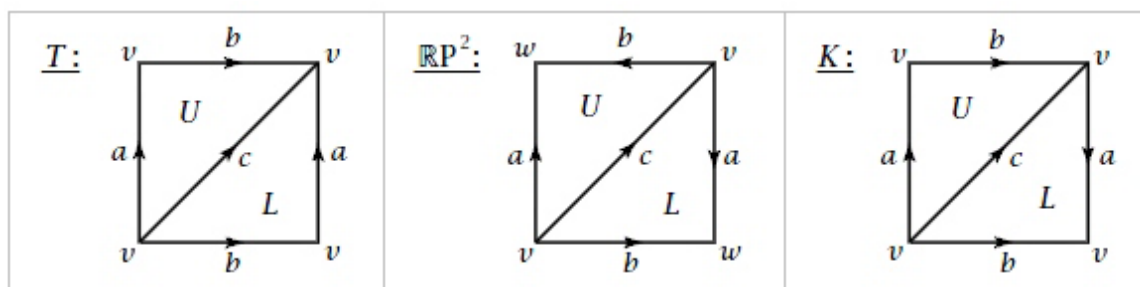
- (i) Ο περιορισμός $\sigma_a|_{Int(\Delta)^n}$ είναι επιμορφισμός, και κάθε σημείο του X ανήκει στην εικόνα σκριβώς ενός τέτοιου περιορισμού $\sigma_a|_{Int(\Delta)^n}$.
- (ii) Κάθε περιορισμός του σ_a σε μία έδρα του Δ^n είναι μία από τις απεικονίσεις $\sigma_\beta : \Delta^{n-1} \rightarrow X$. Εδώ ταυτίζουμε την έδρα του Δ^n με το Δ^{n-1} με τον κανονικό γραμμικό ομοιομορφισμό μεταξύ τους που διατηρεί την διάταξη των κορυφών (δείτε Εικόνα 1.8).



Σχήμα 1.8: Απαγορευμένες τομές.

(iii) Ένα σύνολο $A \subset X$ είναι ανοικτό αν και μόνο αν $\sigma_\alpha^{-1}(A)$ είναι ανοικτό στον Δ^n για κάθε σ_α .

Μία επίπτωση του (iii) είναι ότι ο X μπορεί να χτιστεί ταυτίζοντας κάθε έδρα ενός Δ_α^n με το Δ_β^{n-1} που αντιστοιχεί στον περιορισμό σ_β του σ_α στην προκειμένη έδρα, όπως στην Εικόνα 1.9.



Σχήμα 1.9: Μία δομή Δ -συμπλόκων πάνω στον τόρο, το προβολικό επίπεδο, και το Klein bottle. Κάθε χώρος μπορεί να προκύψει από ένα τετράγωνο ταυτίζοντας τις απέναντι ακμές όπως υποδεικνύουν τα τόξα. Κόβοντας ένα τετράγωνο κατά μήκος μίας διαγωνίου παράγει δύο τρίγωνα ταυτίζοντας κατα ζεύγη τις ακμές τους.

Όπως μπορούμε να δούμε στο παράδειγμα ενός Δ -σμπλόκου στον τόρο, το τόξο δίνει μία φυσική σημασία στην έκφραση $+b$: έστω b η διαδρομή κατά μήκος ενός μονοπατιού b κατά την κατεύθυνση του τόξου. Τότε $2b$ ορίζει μία διαδρομή δύο φορές γύρω από το b και $-b$ μία διαδρομή κατά μήκος του b με τον αντίθετο προσανατολισμό. Άρα, αποδίδουμε νόημα στο nb για κάθε $n \in \mathbb{Z}$. Αντίστοιχη σημασία έχει κάθε πολλαπλάσιο μίας ακμής a . Επιπλέον, $a + b$ σημαίνει μία διαδρομή μπροστά κατά μήκος του μονοπατιού a και μετά κατά μήκος του b .

Με βάση τα n -σμπλοκα και την σχέση που ορίσαμε μπορούμε να φτιάξουμε ομάδες. Έστω $C_n(X)$ η ελεύθερη αβελιανή ομάδα με βάση τα ανοικτά n -σμπλοκα σ_α του X . Τα στοιχεία του $C_n(X)$ ονομάζονται n -αλυσίδες, και μπορούν να γραφτούν σαν πεπερασμένα τυπικά αθροίσματα $\sum_\alpha n_\alpha \sigma_\alpha$.

Το *σύνоро* ενός n -σμπλόκου είναι το n -σμπλοκο που αποτελείται από όλα τα $(n-1)$ -σμπλοκα που είναι έδρες του $\langle v_0, \dots, v_n \rangle$, με τον προσανατολισμό που κληρονομούν από τον προσανατολισμό του $\langle v_0, \dots, v_n \rangle$. Για ένα γενικό Δ -σμπλοκο X ορίζουμε έναν ομομορφισμό *σύνоро* $\partial_n : C_n(X) \rightarrow C_{n-1}(X)$ καθορίζοντας τις τιμές του στα στοιχεία της βάσης.

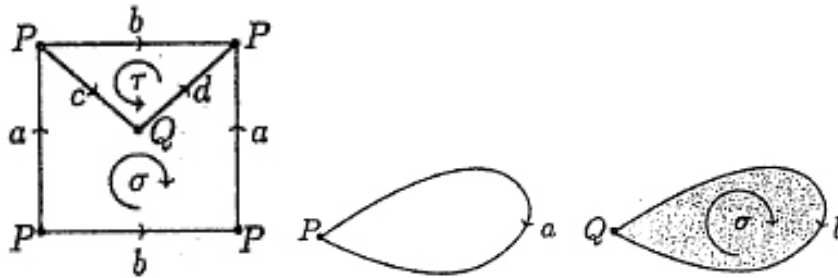
$$\partial_n(\sigma_\alpha) = \sum_t (-1)^t \sigma_\alpha | \langle v_0, \dots, \bar{v}_t, \dots, v_n \rangle \quad (1.2)$$

Λήμμα 1.3.1. Η σύνθεση $C_n(X) \xrightarrow{\partial_n} C_{n-1}(X) \xrightarrow{\partial_{n-1}} C_{n-2}(X)$ είναι μηδέν.

Άρα έχουμε ορίσει έναν ομομορφισμό *σύνоро* για ομάδες αλυσίδων υποδιαϊρώντας σμπλοκα κελιών σε υποσμπλοκα, και έχουμε μία ακολουθία ομομορφισμού αβελιανών ομάδων

$$\dots \rightarrow C_{n+1} \xrightarrow{\partial_{n+1}} C_n \xrightarrow{\partial_n} C_{n-1} \rightarrow \dots \rightarrow C_1 \xrightarrow{\partial_1} C_0 \xrightarrow{\partial_0} 0 \quad (1.3)$$

με $\partial_n \partial_{n+1} = 0$ για κάθε n . Μία τέτοια ακολουθία λέγεται *σμπλοκο αλυσίδων*. Η εικόνα του ∂_{n+1} περιέχεται στον πυρήνα του ∂_n για κάθε n . Εάν η εικόνα του ∂_{n+1} ισούται με τον πυρήνα του ∂_n για κάθε n , η ακολουθία λέγεται *ακριβής*. Εάν όχι, μελετάμε την απόκλιση της από το να είναι ακριβής ορίζοντας την $n^{st}h$ -ομάδα ομολογίας του σμπλόκου αλυσίδων ως την ομάδα πηλίκο $H_n = \ker \partial_n / \text{Im} \partial_{n+1}$. Τα στοιχεία του $\ker \partial_n$ λέγονται *κυκλήματα* και τα στοιχεία του $\text{Im} \partial_{n+1}$ λέγονται *σύνορα*. Τα στοιχεία του H_n είναι σμπλοκα του $\text{Im} \partial_{n+1}$, που ονομάζονται *κλάσεις ομολογίας*. Δύο κυκλήματα που αναπαραστούν την ίδια κλάση ομολογίας λέγονται *ομολογικά* (συμβολίζουμε $a \sim b$). Αυτό σημαίνει ότι η διαφορά τους είναι ένα σύνορο (δείτε Εικόνα 1.10).



Σχήμα 1.10: a) Είναι $c + d \sim b$, αφού η διαφορά τους είναι το σύνορο ενός 2-κελιού τ , δηλαδή $\partial(\tau) = c + d - b$. b) Το σύνορο του a είναι μηδέν, όμως $a \neq 0$, αφού δεν είναι το σύνορο ενός 2-κελιού (περικλύει μία κοιλότητα). c) Από την άλλη, $b \sim 0$, αφού είναι το σύνορο ενός 2-κελιού σ και το σύνορό του είναι μηδέν.

Για μία απεικόνιση $f : X \rightarrow Y$, ένας επαγόμενος ομομορφισμός $f_{\natural} : C_n(X) \rightarrow C_n(Y)$ ορίζεται συνθέτοντας κάθε μοναδικό n -σύμπλοκο $\sigma : \Delta^n \rightarrow X$ με την f για να λάβουμε ένα μοναδικό n -σύμπλοκο $f_{\natural}(\sigma) = f\sigma : \Delta^n \rightarrow Y$, και επεκτείνοντας την f_{\natural} γραμμικά μέσω της $f_{\natural}(\sum_i n_i \sigma_i) = \sum_i n_i f_{\natural}(\sigma_i) = \sum_i n_i f\sigma_i$. Οι απεικονίσεις $f_{\natural} : C_n(X) \rightarrow C_n(Y)$ ικανοποιούν $f_{\natural}\partial = \partial f_{\natural}$. Άρα οι f_{\natural} ορίζουν μία απεικόνιση αλυσίδων από το μοναδικό σύμπλοκο αλυσίδων του X σε αυτό του Y . Από την σχέση $f_{\natural}\partial = \partial f_{\natural}$ επάγεται ότι η f_{\natural} στέλνει κυκλήματα σε κυκλήματα αφού $\partial\alpha = 0$ σημαίνει $\partial(f_{\natural}\alpha) = f_{\natural}(\partial\alpha) = 0$. Επίσης, f_{\natural} στέλνει σύνορα σε σύνορα. Άρα f_{\natural} επάγει έναν ομομορφισμό $f_* : H_n(X) \rightarrow H_n(Y)$.

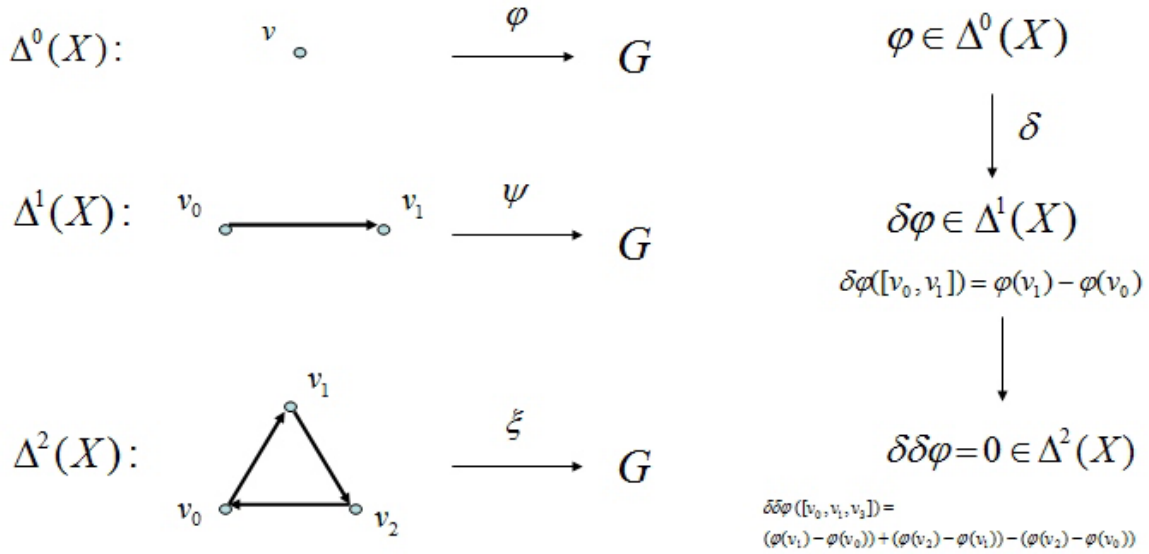
Πρόταση 1.3.2. Μία απεικόνιση αλυσίδων μεταξύ συμπλόκων αλυσίδων επάγει ομομορφισμούς μεταξύ των ομάδων ομολογίας των δύο συμπλόκων.

1.4 Συνομολογία

Δοθέντος ενός χώρου X και μίας αβελιανής ομάδας G , ορίζουμε την ομάδα $C^n(X; G)$ της μοναδικής n -συναλυσίδας με συντελεστές στον G να είναι η δυική ομάδα $\text{Hom}(C_n(X), G)$ της μοναδικής ομάδας αλυσίδων $C_n(X)$. Άρα μία n -συναλυσίδα $\phi \in C^n(X; G)$ αντιστοιχεί σε κάθε μοναδικό n -σύμπλοκο $\sigma : \Delta^n \rightarrow X$ μία τιμή $\phi(\sigma) \in G$.

Η απεικόνιση συν-συνόρου $\delta : C^n(X; G) \rightarrow C^{n+1}(X; G)$ είναι η δυική ∂^* , άρα για μία συναλυσίδα $\phi \in C^n(X; G)$, το συν-σύνορο του $\delta\phi$ είναι η σύνθεση $C_{n+1}(X) \xrightarrow{\partial} C_n(X) \xrightarrow{\phi} G$. Αυτό σημαίνει ότι για ένα μοναδικό $(n + 1)$ -σύμπλοκο $\sigma : \Delta^{n+1} \rightarrow X$ έχουμε

$$\delta\phi(\sigma) = \sum_i (-1)^i \phi(\sigma[v_0, \dots, \bar{v}_i, \dots, v_{n+1}]) \tag{1.4}$$



Σχήμα 1.11: Για μία αβελιανή ομάδα G , το σύνολο όλων των συναρτήσεων από αμές του X στην G αποτελεί επίσης μία αβελιανή ομάδα, την οποία συμβολίζουμε $\Delta^0(X; G)$. Ομοίως, έχουμε $\Delta^1(X; G), \Delta^2(X; G)$. Μία συνάρτηση $\phi \in \Delta^0(X; G)$ έχει $\delta\phi = 0$ αν και μόνο αν η ϕ έχει την ίδια τιμή και στα δύο άκρα κάθε ακμής του X . Η $H^1(X; G) = \Delta^1(X; G)/\text{Im}\delta$ θα είναι τετριμμένη αν και μόνο αν η εξίσωση $\delta\phi = \psi$ έχει μία λύση $\phi \in \Delta^0(X; G)$ για κάθε $\psi \in \Delta^1(X; G)$. $\delta\psi = 0$ αν και μόνο αν η ψ ικανοποιεί την προσθετική ιδιότητα $\psi([v_0, v_2]) = \psi([v_0, v_1]) + \psi([v_1, v_2])$.

Προφανώς έχουμε ότι $\delta^2 = 0$ αφού δ^2 είναι ο δυϊκός του $\partial^2 = 0$. Έτσι μπορούμε να ορίσουμε την ομάδα συνολογίας $H^n(X; G)$ με συντελεστές στον G να είναι το πηλίκο $\ker \delta / \text{Im}\delta$ στην $C^n(X; G)$ στο σύμπλοκο συναλυσίδων

$$\dots \leftarrow C^{n+1}(X; G) \xleftarrow{\delta} C^n(X; G) \leftarrow \dots \leftarrow C^0(X; G) \leftarrow 0 \quad (1.5)$$

Στοιχεία του $\ker \delta$ είναι τα *συνκυκλήματα*, και στοιχεία του $\text{Im}\delta$ είναι τα *συν-σύνορα*. Μια συναλυσίδα ϕ είναι ένα *συνκύκλημα* αν $\delta\phi = \phi\partial = 0$, ή με άλλα λόγια, αν ϕ μηδενίζεται στα σύνορα.

1.4.1 Δυϊκός ισομορφισμός Poincaré

Έστω ότι μία κλειστή προσανατολισμένη πολλαπλότητα M^n διασπάται σε κελιά με δύο διαφορετικούς τρόπους έτσι ώστε να υπάρχει μία 1-1 αντιστοιχία μεταξύ των ανοικτών k -κελιών της μίας διάσπασης και τα ανοικτά $(n-k)$ -κελιά της άλλης διάσπασης. Συμβολίζουμε τα αντίστοιχα ανοικτά κελιά ως σ_i και σ_i^* αντίστοιχα. Ας υποθέσουμε ότι $\sigma_i \cap \sigma_j^* = \emptyset$ για $i \neq j$ και ότι τα κελιά σ_i και σ_i^* τέμνονται κάθετα σε ένα σημείο για κάθε i . Θεωρούμε ότι τα κελιά σ_i και σ_i^* είναι προσανατολισμένα έτσι ώστε τα e_1, \dots, e_k και $\epsilon_1, \dots, \epsilon_{n-k}$ να είναι θετικά προσανατολισμένες βάσεις για το M^n . Τέλος υποθέτουμε ότι η ομάδα των συντελεστών είναι η προσθετική ομάδα ενός προσεταιριστικού αντιμεταθετικού δακτυλίου R με ταυτοτικό στοιχείο. Σε αυτή την περίπτωση, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι ο αριθμός διασταυρώσεων για τις αλυσίδες $\sum a_i \sigma_i$ και $\sum b_i \sigma_i^*$ ορίζονται ως

$$\text{int}(\sum a_i \sigma_i, \sum b_i \sigma_i^*) = \sum \delta_{ij} a_i b_j = \sum a_i b_i \quad (1.6)$$

Το απαραίτητο ζεύγος των διασπάσεων κελιών K και K^* μπορεί να κατασκευαστεί ως εξής: Για K θεωρούμε μία τυχαία τριγωνοποίηση της πολλαπλότητας M^n . Έστω K' η βαρυκεντρική διάσπαση αυτής της τριγωνοποίησης. Για κάθε σύμπλοκο Δ^k της τριγωνοποίησης του K , έστω όλα τα σύμπλοκα του K' που τέμνουν το Δ^k ακριβώς στο βαρύκεντρό του. Η ένωσή τους είναι ένα κλειστό $(n-k)$ -κελί, συμβολίζουμε με $(\Delta^k)^*$. Αυτά τα κελιά αποτελούν την διάσπαση του K^* .

Χρησιμοποιώντας τον αριθμό διασταυρώσεων, κατασκευάζουμε μία διγραμμική απεικόνιση

$$\phi : H_k(M^n; R) \times H_{n-k}(M^n; R) \rightarrow R. \quad (1.7)$$

Πιο συγκεκριμένα, παίρνουμε τις διασπάσεις των K και K^* , και επιλέγουμε τα κελιά $\sum a_i \sigma_i$ και $\sum b_i \sigma_i^*$ που αναπαριστούν τις κλάσεις ομολογίας $\alpha \in H_k(M^n; R)$ και $\beta \in H_{n-k}(M^n; R)$, και ορίζουμε $\phi(\alpha, \beta)$ να είναι ο αριθμός διασταυρώσεων αυτών των κελιών (κυκλήματων). Μπορούμε να εξακριβώσουμε ότι αυτός ο αριθμός διασταυρώσεων δεν εξαρτάται από τα κυκλήματα που αναπαριστούν τα α και β .

Χρησιμοποιώντας τις διασπάσεις κελιών των K και K^* , μπορούμε να λάβουμε την αντιστοιχία μεταξύ των αλυσίδων $\sum a_i \sigma_i$ και $\sum a_i \sigma_i^*$. Ωστόσο, αυτή η αντιστοιχία δεν έχει ενδιαφέρον ως προς την ομολογία επειδή οι αλυσίδες $(\partial \sigma)^*$ και $\partial(\sigma^*)$ ανήκουν σε διαφορετικούς χώρους (δηλαδή, εάν $\dim \sigma = k$, τότε $\dim(\partial \sigma)^* = n - k + 1$, όπου $\dim \partial(\sigma^*) = n - k - 1$). Είναι πιο φυσικό να συσχετίσουμε κάθε αλυσίδα $c_k = \sum a_i \sigma_i$ με μία συναλυσίδα c^{n-k} για την οποία $c^{n-k}(\sigma_i^*) = a_i$, δηλαδή,

$$c^{n-k}(\sum b_i \sigma_i^*) = \sum a_i b_i = \text{int}(c_k, \sum b_i \sigma_i^*). \quad (1.8)$$

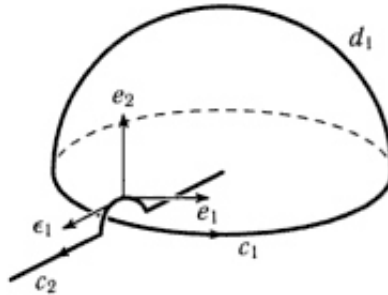
Με άλλα λόγια η τιμή της συναλυσίδας c^{n-k} στη συγκεκριμένη αλυσίδα ισούται με τον αριθμό διασταυρώσεων του c^{n-k} με το c_k και μία τέτοια συναλυσίδα υπάρχει και είναι μοναδική.

Έχουμε

$$\begin{aligned} \delta c^{n-k}(d_{n-k+1}) &= c^{n-k}(\partial d_{n-k+1}) \\ &= \text{int}(c_k, \partial d_{n-k+1}) = (-1)^k \text{int}(\partial c_k, d_{n-k+1}), \end{aligned} \quad (1.9)$$

δηλαδή, με κάθε αλυσίδα της μορφής ∂c_k σχετίζεται η συναλυσίδα $\pm \delta c^{n-k}$. Συγκεκριμένα, αυτό σημαίνει ότι στα κυκλήματα και τα σύνορα αντιστοιχούν συνκυκλήματα και συνσύννορα, αντίστοιχα. Άρα αυτός ο ισομορφισμός μεταξύ του χώρου των k -αλυσίδων στον K και του χώρου των $(n-k)$ -συναλυσίδων στον K^* επάγει έναν ισομορφισμό μεταξύ των ομάδων $H_k(M^n; R)$ και $H^{n-k}(M^n; R)$, που λέγεται *ισομορφισμός δυϊκότητας Poincaré*.

Παρατήρηση 1.4.1. Έστω c_1, c_2 κλειστές προσανατολισμένες καμπύλες στον S^3 . Καθορίζουν τα μονοδιάστατα κυκλήματα (με συντελεστές στον \mathbb{Z}), τα οποία επίσης συμβολίζουμε με c_1, c_2 . Έστω d_1 μία διδιάστατη αλυσίδα τέτοια ώστε $\partial d_1 = c_1$. Ο αριθμός διασταυρώσεων $\text{int}(d_1, c_2)$ ισούται με τον αριθμό περιέλιξης των καμπύλων c_1 και c_2 , $lk(c_1, c_2)$. Είναι εύκολο να εξακριβώσουμε ότι ο αριθμός διασταυρώσεων $\text{int}(d_1, c_2)$ δεν εξαρτάται από την επιλογή του d_1 . Πράγματι, εάν d'_1 είναι μία άλλη αλυσίδα για την οποία $\partial d'_1 = \partial d_1$, τότε $d'_1 - d_1$ είναι ένα κύκλημα και, άρα, ένα σύνορο (επειδή η διδιάστατη ομάδα ομολογίας της σφαίρας S^3 είναι τετριμμένη). Έστω e μία τριδιάστατη αλυσίδα για την οποία $d'_1 - d_1 = \partial e$. Τότε $\text{int}(d'_1 - d_1, c_2) = \text{int}(\partial e, c_2) = \text{int}(e, \partial c_2) = 0$. Είναι εύκολο να δείξουμε ότι αυτός ο ορισμός είναι ισοδύναμος με το μισό αλγεβρικό άθροισμα των διασταυρώσεων μεταξύ των δύο καμπυλών σε οποιαδήποτε προβολή τους. Για να δείξουμε ότι οι δύο ορισμοί είναι ισοδύναμοι, τοποθετούμε τις καμπύλες c_1, c_2 έτσι ώστε να αφήνουν το επίπεδο του διαγράμματος μόνο σε μικρές γειτονιές των διασταυρώσεων. Μπορούμε επίσης να υποθέσουμε ότι η επιφάνεια d_1 βρίσκεται πάνω από το επίπεδο του διαγράμματος, εκτός από μικρές γειτονιές των διασταυρώσεων (δείτε Εικόνα 1.12).

Σχήμα 1.12: Η επιφάνεια d_1 .

Ενδιαφερόμαστε μόνο στις διασταυρώσεις όπου η καμπύλη c_2 περνά πάνω από την c_1 . Αυτά είναι ακριβώς τα σημεία όπου η c_2 τέμνει την επιφάνεια d_1 . Τα πρόσημα δεν προκαλούν κανένα πρόβλημα. Για παράδειγμα στην Εικόνα 1.12, η βάση e_1, e_2, c_1 είναι προσανατολισμένη θετικά (χρησιμοποιούμε τον ίδιο συμβολισμό όπως στον ορισμό του αριθμού διασταυρώσεων): αυτό αντιστοιχεί σε μία θετική διασταύρωση.

1.5 Χώροι επικάλυψης

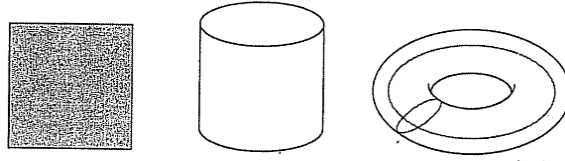
1.5.1 Χώροι γινόμενα και χώροι πηλίκα

Σε αυτή την παράγραφο μελετάμε τρόπους κατασκευής νέων τοπολογικών χώρων από παλιούς.

Δοθέντων τοπολογιών στους X και Y , μία τοπολογία ορίζεται φυσικά στον $X \times Y = \{(x, y) : x \in X, y \in Y\}$.

Ορισμός 1.5.1. Έστω X ένας τοπολογικός χώρος με τοπολογία τ και Y ένας τοπολογικός χώρος με τοπολογία τ' . Μία βάση για την τοπολογία γινόμενο στον $X \times Y$ δίνεται από τον B όπου $N \in B$ αν N είναι της μορφής $N = O \times O'$ για $O \in \tau$ και $O' \in \tau'$. Συναρτήσεις προβολής $p_X : X \times Y \rightarrow X$ και $p_Y : X \times Y \rightarrow Y$ ορίζονται ως $p_X(x, y) = x$ ανδ $p_Y(x, y) = y$

Παρατηρούμε ότι κανείς ξεκινά με την συλλογή όλων των ανοικτών συνόλων του X και του Y , αλλά καταλήγει σε μία βάση ή ένα σύστημα γειτονιών του $X \times Y$, όχι όλη την τοπολογία.

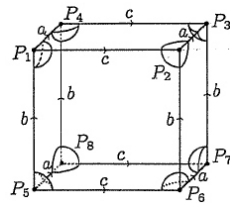


Σχήμα 1.13: Έστω I το μοναδιαίο διάστημα $[0, 1]$ και S^1 ο μοναδιαίος κύκλος, τότε $I \times I$ είναι το μοναδιαίο τετράγωνο, $S^1 \times I$ είναι ένας κύλινδρος, και $S^1 \times S^1$ ένας τόρος.

Παράδειγμα 1: Ο τόρος είναι ο χώρος $S^1 \times S^1$, δείτε Εικόνα 1.13. Ο τόρος με το εσωτερικό του είναι το γινόμενο $S^1 \times D^2$, το γινόμενο $S^1 \times S^1 \times I$ είναι ο πεπαχυμένος τόρος, και $S^1 \times S^1 \times S^1$ είναι ο τρία τόρος, T^3 .

Ορισμός 1.5.2. Έστω X ένας τοπολογικός χώρος με \sim μία σχέση ισοδυναμίας ορισμένη στον X . Ορίζουμε την κλάση ισοδυναμίας $x \in X$ με $[x] = \{y \in X : y \sim x\}$. Ο χώρος ταύτισης X/\sim ορίζεται ως το σύνολο των κλάσεων ισοδυναμίας της σχέσης \sim , άρα $X/\sim = \{[x] : x \in X\}$. Υπάρχει μία φυσική συνάρτηση $f : X \rightarrow X/\sim$ που ορίζεται ως $f(x) = [x]$. Έστω τ η τοπολογία του X . Ορίζουμε την τοπολογία πηλίκο τ' στον X/\sim ορίζοντας $U \subset X/\sim$ να είναι ανοιχτό αν $f^{-1}(U)$ είναι ανοιχτό στον X . Άρα $X/\sim \in \tau$ αν και μόνο αν $f^{-1}(X/\sim) \in \tau$.

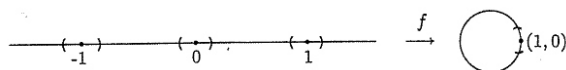
Ένας νέος χώρος είναι ένας τρόπος να πούμε ότι ένας νέος χώρος δημιουργήθηκε παίρνοντας τον έναν χώρο X και κολλώντας κάθε x σε κάθε y που ικανοποιεί $y \sim x$, δείτε Εικόνα 1.16.



Σχήμα 1.14: Μία γειτονιά του $[x] \in X/\sim$ ορίζεται σαν ένα σύνολο τέτοιο ώστε η αντίστροφη εικόνα του X είναι μία ένωση γειτονιών όλων των σημείων του y με $y \sim x$.

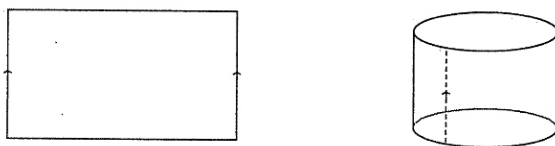
Παράδειγμα 2: Ένα παράδειγμα αυτής της κατασκευής είναι η συνάρτηση $f : \mathbb{R} \rightarrow S^1$ από όλους τους πραγματικούς αριθμούς στον κύκλο $S^1 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 + y^2 = 1\}$ που ορίζεται ως $f(t) = (\cos(2\pi t), \sin(2\pi t))$. Παρατηρούμε ότι $f(t) \in S^1$ αφού $\cos^2(2\pi t) + \sin^2(2\pi t) = 1$ για κάθε $t \in \mathbb{R}$. Τότε $f(0) = (1, 0)$, $f(\frac{1}{4}) = (0, 1)$, $f(\frac{1}{2}) = (-1, 0)$, \dots , $f(1) = (1, 0)$, κλπ. Τότε η δράση της f μπορεί να αναπαρασταθεί τυλίγοντας την γραμμή με φορά αντίστροφη της

φοράς του ρολογιού γύρω από τον κύκλο, έτσι ώστε $f(0) = f(1) = \dots = f(n) = (1, 0)$ για $n \in \mathbb{Z}$. Ένας άλλος τρόπος για να περιγράψουμε αυτό το παράδειγμα είναι ορίζοντας μία σχέση ισοδυναμίας στον \mathbb{R} με $t \sim s$ εάν $s = t + n$ για κάποιο $n \in \mathbb{Z}$, που είναι μία σχέση ισοδυναμίας. Τότε \mathbb{R}/\sim είναι το σύνολο των πραγματικών αριθμών με το 0 κολλημένο στο $1, 2, \dots, -1, -2, \dots$, και κολλημένο στο $\frac{5}{4}, \frac{9}{4}, \frac{13}{4}, \frac{17}{4}, \dots$, κλπ. Με άλλα λόγια, παίρνουμε ένα διάστημα $[0, 1]$ και κολλάμε το σημείο 0 στο 1, τότε παίρνουμε το διάστημα $(1, 2]$ και το τυλίγουμε γύρω από τον κύκλο, κολλώντας το $\frac{5}{4}$ στο σημείο $\frac{1}{4}, \frac{3}{2}$ στο $\frac{1}{2}$, και 2 στο 1, κλπ. Επαναλαμβάνουμε για το $(2, 3]$, κλπ. Ο χώρος \mathbb{R}/\sim μοιάζει με έναν κύκλο S^1 , με την γραμμή των πραγματικών αριθμών τυλιγμένη γύρω του άπειρες φορές.



Σχήμα 1.15: Το \mathbb{R} με την ταύτιση που ορίζει η f τυλίγεται γύρω από τον κύκλο.

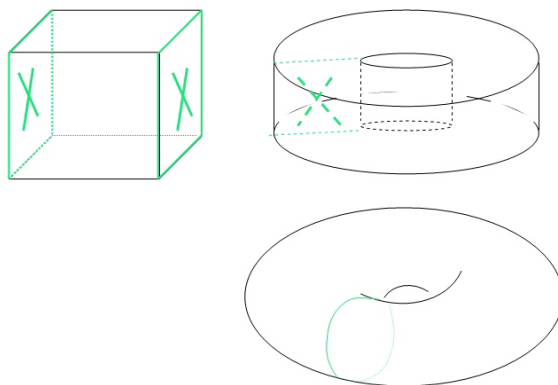
Παράδειγμα 3: Ο κύλινδρος κατασκευάζεται με αυτόν τον τρόπο από το μοναδιαίο τετράγωνο X στον \mathbb{R}^2 όπου $X = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$ και x πάει από τα αριστερά στα δεξιά και το y από κάτω προς τα πάνω. Άρα τα σημεία στις πάνω και κάτω ακμές έχουν $y = 0$ ή 1 , και οι αριστερές και δεξιές ακμές έχουν $x = 0, 1$. Η σχέση ισοδυναμίας που ορίζεται αφήνοντας την κλάση ισοδυναμίας $[(x, y)]$ να αποτελείται μόνο από το σημείο (x, y) εάν $x \neq 0, 1$, έτσι ώστε το σημείο (x, y) δεν είναι κολλημένο σε κανένα άλλο σημείο του εσωτερικού των πάνω και κάτω ακμών του τετραγώνου, και ορίζοντας $(0, y) \sim (1, y)$ για κάθε y . Τα σημεία στην αριστερή ακμή του τετραγώνου κολλώνται στα αντίστοιχα σημεία στην δεξιά ακμή. Άρα, $[(x, y)] = \{(x, y)\}$ εάν $x \neq 0, 1$ και $0 \leq y \leq 1$, ή $[(x, y)] = \{(0, y) \sim (1, y)\}$ εάν $x = 0, 1$ και $0 \leq y \leq 1$.



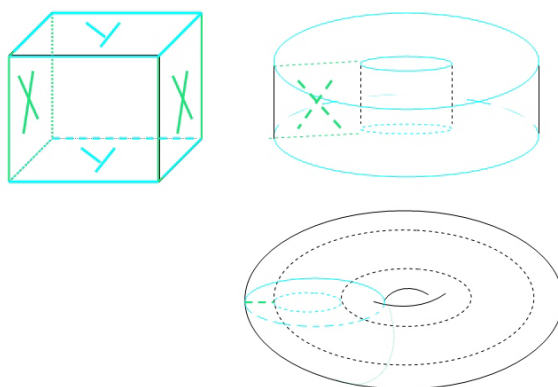
Σχήμα 1.16: Κολλώντας τις ακμές ενός τετραγώνου φτιάχνουμε έναν κύλινδρο.

Παράδειγμα 4: Ο τόρος με εσωτερικό δημιουργείται από την ταύτιση ενός ζεύγους απέναντι εδρών ενός μοναδιαίου κύβου. Ένας άλλος τρόπος να το δούμε αυτό, είναι ορίζοντας μία σχέση ισοδυναμίας στον \mathbb{R}^3 με $(t_1, t_2, t_3) \sim (s_1, s_2, s_3)$ εάν $s_1 = t_1 + n$ για κάποιο $n \in \mathbb{Z}$. Ο πεπαχυμένος τόρος δημιουργείται από την ταύτιση δύο ζευγών απέναντι εδρών του κύβου. Ένας

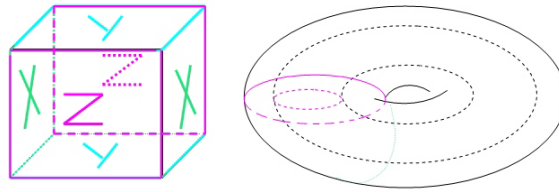
άλλος τρόπος να το δούμε αυτό είναι ορίζοντας μία σχέση ισοδυναμίας στον \mathbb{R}^3 με $(t_1, t_2, t_3) \sim (s_1, s_2, s_3)$ εάν $(s_1, s_2) = (t_1, t_2) + (n, m)$ για κάποιο $n, m \in \mathbb{Z}$. Ο τρίτος τόρος δημιουργείται με την ταύτιση τριών ζευγών απέναντι εδρών του κύβου και μπορούμε να το δούμε ορίζοντας μία σχέση ισοδυναμίας στον \mathbb{R}^3 με $(t_1, t_2, t_3) \sim (s_1, s_2, s_3)$ εάν $(s_1, s_2, s_3) = (t_1, t_2, t_3) + (n, m, k)$ για κάποιο $n, m, k \in \mathbb{Z}$, δείτε Εικόνες 1.17, 1.18 και 1.19.



Σχήμα 1.17: Κολλώντας δύο έδρες του κύβου φτιάχνουμε έναν τόρο με περιεχόμενο.



Σχήμα 1.18: Κολλώντας τέσσερις έδρες του κύβου φτιάχνουμε έναν πεπαχυμένο τόρο.



Σχήμα 1.19: Κολλώντας όλες τις έδρες του κύβου φτιάχνουμε τον τρία τόρο.

1.5.2 Χώρος επικάλυψης και ολικό κάλυμμα

Ορισμός 1.5.3. Έστω X ένας τοπολογικός χώρος. Ένας χώρος επικάλυψης του X είναι ένας χώρος \bar{X} και μία συνεχής απεικόνιση $p : \bar{X} \rightarrow X$ τέτοια ώστε: κάθε σημείο $x \in X$ έχει μία συνεκτική γειτονιά U τέτοια ώστε το $p^{-1}(U)$ αποτελείται από ένα σύνολο ξένων συνόλων, και εάν V είναι συνεκτική συνιστώσα του $p^{-1}(U)$, τότε ο $p : V \rightarrow U$ είναι ομοιομορφισμός.

Παρατηρούμε ότι εάν (p, X) είναι ένας χώρος επικάλυψης, τότε ο X έχει την τοπολογία πηλίκο σε σχέση με την συνάρτηση p .

Παράδειγμα 1: Συναντήσαμε ένα παράδειγμα χώρου επικάλυψης κατά τον υπολογισμό της $\pi_1(S^1)$, δείτε το Παράδειγμα 1 στην Παράγραφο 1.2. Αυτή είναι η απεικόνιση $\mathbb{R} \rightarrow S^1$ που είδαμε σαν την προβολή μίας έλικας σε έναν κύκλο, με την έλικα να κείται πάνω από τον κύκλο και να τον καλύπτει. Πιο συγκεκριμένα, έχουμε $p : \mathbb{R} \rightarrow S^1$ που δίνεται ως $p(t) = (\cos 2\pi t, \sin 2\pi t)$, και το κάλυμμα $\{U_\alpha\}$ μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από ανοικτά τόξα των οποίων η ένωση είναι το S^1 . Ένα σχετικό παράδειγμα είναι η ελικοειδής επιφάνεια $S \subset \mathbb{R}^3$ που αποτελείται από σημεία της μορφής $(s \cos 2\pi t, s \sin 2\pi t, t)$ για $(s, t) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}$. Αυτό προβάλλεται στον $\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ μέσω της απεικόνισης $(x, y, z) \rightarrow (x, y)$, και αυτή η προβολή ορίζει έναν χώρο επικάλυψης $p : S \rightarrow \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ αφού για κάθε ανοικτό δίσκο U στον $\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$.

Ορισμός 1.5.4. Δοθέντων των σημείων x και y του χώρου X , ένα μονοπάτι στον X από το x στο y είναι μία συνεχής απεικόνιση $f : [a, b] \rightarrow X$ ενός κλειστού διαστήματος στους πραγματικούς πάνω στον X , έτσι ώστε $f(a) = x$ και $f(b) = y$. Ένας χώρος X ονομάζεται *δρομοσυννεκτικός* αν κάθε ζεύγος σημείων του X μπορούν να ενωθούν με ένα μονοπάτι στον X . Ένας χώρος λέγεται απλά *συννεκτικός* αν είναι ένας δρομοσυννεκτικός χώρος και εάν $\pi_1(X, x_0)$ είναι το τετριμμένο στοιχείο για κάποιο $x_0 \in X$, και άρα για κάθε $x_0 \in X$.

Ένας απλά συννεκτικός χώρος επικάλυψης ενός δρομοσυννεκτικού χώρου είναι ένας χώρος επικάλυψης κάθε άλλου δρομοσυννεκτικού χώρου επικάλυψης του X . Ένας απλά συννεκτικός καλυπτικός χώρος X θα ονομάζεται *ολικό κάλυμμα*. Είναι μοναδικό ως προς ομομορφισμό,

γί αυτό ονομάζεται ολικό κάλυμμα. Πιο γενικά, υπάρχει μία μερική διάταξη μεταξύ των διαφορετικών δρομοσυννεκτικών καλυματικών χώρων του X , ανάλογα με το ποιοί είναι καλύμματα ποιών. Αυτό αντιστοιχεί στην μερική διάταξη μέσω υποσυνόλων των αντίστοιχων υποομάδων της $\pi_1(X)$, ή κλάσεις συζυγίας των υποομάδων εάν αγνοήσουμε τα σημεία βάσης.

Παράδειγμα 2: Το ολικό κάλυμμα του τόρου με περιεχόμενο είναι ο $\mathbb{R} \times I$, που πρόκειται για ένα κάλυμμα που προκύπτει από άπειρα διπλώματα ενώνοντας τους κύβους κατά μήκος των x -εδρών τους. Το ολικό κάλυμμα του πεπαχυμένου τόρου είναι ο \mathbb{R}^2 ενώνοντας τους κύβους κατά μήκος των x - και y -εδρών. Το ολικό κάλυμμα του τρία τόρου είναι ο \mathbb{R}^3 ενώνοντας τους κύβους κατά μήκος των x -, y - και z -εδρών.

Ιδιότητες ανύψωσης

Λήμμα 1.5.5. Έστω (\bar{X}, p) ένας χώρος επικάλυψης του X , $\bar{x}_0 \in \bar{X}$, και $x_0 = p(\bar{x}_0)$. Τότε για κάθε μονοπάτι $f : I \rightarrow X$ με αρχικό σημείο το x_0 , υπάρχει ένα μοναδικό μονοπάτι $g : I \rightarrow \bar{X}$ με αρχικό σημείο το \bar{x}_0 , τέτοιο ώστε $pg = f$.

Λήμμα 1.5.6. Έστω (\bar{X}, p) ένας χώρος επικάλυψης του X και έστω Y ένας συνεκτικός χώρος. Δοθέντων δύο συνεχών μονοπατιών $f_0, f_1 : Y \rightarrow \bar{X}$ τέτοια ώστε $pf_0 = pf_1$, το σύνολο $\{y \in Y : f_0(y) = f_1(y)\}$ είναι είτε κενό είτε όλο το Y .

Λήμμα 1.5.7. Έστω (\bar{X}, p) ένας χώρος επικάλυψης του X και έστω $g_0, g_1 : I \rightarrow \bar{X}$ μονοπάτια στον \bar{X} που έχουν το ίδιο αρχικό σημείο. Εάν $pg_0 \sim pg_1$, τότε $g_0 \sim g_1$. Πιο συγκεκριμένα, τα g_0 και g_1 έχουν το ίδιο τελικό σημείο.

Λήμμα 1.5.8. Εάν (\bar{X}, p) είναι ένας χώρος επικάλυψης του X , τότε τα σύνολα $p^{-1}(x)$ για κάθε $x \in X$ έχουν την ίδια πληθικότητα.

Θεώρημα 1.5.9. Έστω (\bar{X}, p) ένας χώρος επικάλυψης του X , $\bar{x}_0 \in \bar{X}$, και $x_0 = p(\bar{x}_0)$. Τότε ο επαγόμενος ομομορφισμός $p_* : \pi(\bar{X}, \bar{x}_0) \rightarrow \pi(X, x_0)$ είναι ένας μονομορφισμός.

Λήμμα 1.5.10. Έστω $p : E \rightarrow B$ μία καλυπτική απεικόνιση. Έστω $p(e_0) = b_0$. Εάν E είναι απλά συνεκτικός, τότε το b_0 έχει μία γειτονιά U έτσι ώστε η προσθήκη $i : U \rightarrow B$ επάγει τον τετριμμένο ομομορφισμό.

Απόδειξη. Έστω U μία γειτονιά του b_0 που καλύπτεται ομοιόμορφα από το p . Σπαζουμε το $p^{-1}(U)$ σε κομμάτια: έστω U_α το κομμάτι που περιέχει το e_0 . Έστω f μία καμπύλη στον U με βάση το b_0 . Επειδή το p ορίζει έναν ομομορφισμό του U_α με τον U , η καμπύλη f ανηψώνεται σε μία καμπύλη \bar{f} στο U_α με βάση το e_0 . Αφού το E είναι απλά συνεκτικό, υπάρχει μία ομοτοπία μονοπατιών $\bar{F} \in E$ μεταξύ του \bar{f} και μίας σταθερής καμπύλης. Τότε $p \circ \bar{F}$ είναι μία ομοτοπία μονοπατιών μεταξύ των f και μίας σταθερής καμπύλης. \square

1.6 Χειρουργική

Οι κόμβοι σχετίζονται στενά με κλειστές, συννεκτικές, προσανατολισμένες (ΚΣΠ) 3-πολλαπλότητες, καθώς κάθε (ΚΣΠ) 3-πολλαπλότητα μπορούν να κατασκευαστούν μέσω τοπολογικής χειρουργικής κατά μήκος ενός κρίκου (Lickorish-Wallace) [116].

Για μία συγκεκριμένη ακτίνα R , ο βασικός ορισμός του S^3 είναι:

$$S^3 = \{x \in \mathbb{R}^4 : \|x\|_2 = R\} \quad (1.10)$$

Όμως μπορούμε να δώσουμε την παρακάτω αναπαράσταση:

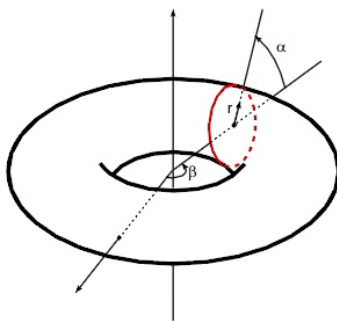
$$S^3 = \{(z, w) \in \mathbb{C}^2 : |z|^2 + |w|^2 = R^2\} \quad (1.11)$$

Ένας άλλος τρόπος να αναπαραστήσουμε την S^3 σύμφωνα με την στερεογραφική προβολή είναι σαν την ένωση του \mathbb{R}^3 με ένα εξωτερικό σημείο. Δεν είναι εύκολο να αναπαρασταθεί γεωμετρικά ούτε στις χαμηλές διαστάσεις. Ωστόσο μπορούμε να φανταστούμε να ενώνουμε όλο το άπειρο σύνορο του \mathbb{R}^3 με ένα εξωτερικό σημείο. Όμως είναι δύσκολο να το δούμε διότι είναι δυνατόν να γίνει μόνο σε έναν 4-διάστατο χώρο.

Θεώρημα 1.6.1. *Η S^3 είναι ομοιομορφική με την ένωση δύο τόρων με περιεχόμενο.*

Απόδειξη. Έστω $S^3 = \{(z, w) \in \mathbb{C}^2 : |z|^2 + |w|^2 = 2\}$, δηλαδή εάν $z = ae^{i\alpha}$, $w = be^{i\beta}$: $(z, w) \in S^3 \leftrightarrow a^2 + b^2 = 2$. Θεωρούμε τώρα $M_1 = \{|z| \leq |w|\}$, $M_2 = \{|z| \geq |w|\}$. Αυτό είναι ισοδύναμο με το $M_1 = \{a \leq 1\}$, $M_2 = \{a \geq 1\}$.

Μένει να δείξουμε ότι οι M_1, M_2 είναι ομοιομορφικοί με τον τόρο με περιεχόμενο. Δείτε την Εικόνα 1.20.



Σχήμα 1.20: Συντενταγμένες στον τόρο με περιεχόμενο.

Μπορούμε να καθιερώσουμε έναν ομοιομορφισμό μεταξύ των M_1 και T^2 ως εξής:

$$\begin{aligned} T^2 &\rightarrow M_1 \\ (r, \alpha, \beta) &\mapsto (re^{i\alpha}, \sqrt{2-r^2}e^{i\beta}) \end{aligned}$$

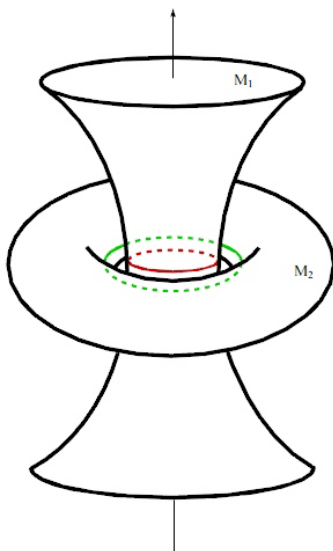
Παρατηρείστε ότι για μία σταθερή τιμή του β , όλα τα σημεία $(0, \alpha, \beta) \in T^2$ είναι το ίδιο σημείο μέσα στον τόρο με περιεχόμενο, πάνω στον κεντρικό κύκλο $a = 0$.

Ομοίως, μπορούμε να ορίσουμε έναν ομοιομορφισμό μεταξύ των M_2 και T^2 . Πράγματι $M_2 = \{a \geq 1\}$, όμως αυτό είναι ισοδύναμο με το να πούμε $M_2 = \{b \leq 1\}$. Έτσι όπως και το M_1 η παρακάτω απεικόνιση δείχνει ότι το M_2 είναι ομοιομορφικό με τον τόρο με περιεχόμενο:

$$\begin{aligned} T^2 &\rightarrow M_2 \\ (r, \alpha, \beta) &\mapsto (\sqrt{2-r^2}e^{i\alpha}, re^{i\beta}). \end{aligned}$$

□

Αυτή η ανάλυση μας επιτρέπει να δούμε την αναπαράσταση του S^3 σαν την συνένωση δύο τόρων με περιεχόμενο. Μπορούμε να θεωρήσουμε έναν από τους τόρους (έστω τον M_2) σαν ένα μέρος του \mathbb{R}^3 . Τότε, αφού $S^3 = \mathbb{R}^3 \cup \{\infty\}$, μπορούμε να πούμε ότι $\mathbb{R}^3 \setminus M_2$ είναι ένας τόρος με περιεχόμενο, εάν προσθέσουμε ένα σημείο στο άπειρο. Μάλιστα μπορούμε απλά να θεωρήσουμε ότι ο κεντρικός άξονας μέσα από την τρύπα του M_2 με ένα εξωτερικό σημείο στο άπειρο είναι ο κεντρικός κύκλος μέσα στον M_1 . Η συνένωση των συνόρων τους γίνεται προσκολλώντας σε κάθε μεσημβρινό του M_1 (ζωγραφισμένο με κόκκινο στην Εικόνα 1.21) μία παράλληλο του M_2 (με πράσινο στην Εικόνα 1.21).



Σχήμα 1.21: Η S^3 σαν συνένωση δύο τόρων με περιεχόμενο στον \mathbb{R}^3 .

Ας θεωρήσουμε τώρα το επόμενο: βγάζουμε τον τόρο με περιεχόμενο T_2 από την S^3 και αντί να το επαναλαμβάνουμε με τον ίδιο τρόπο (που θα παρήγαγε ξανά την S^3), πρώτα εφαρμόζουμε έναν ομοιομορφισμό ϕ στο σύνορό του, ανταλλάσσοντας μεσημβρινούς (α_2) και παράλληλους (β_2).

$$\begin{aligned}\phi : \partial T_2 &\rightarrow \partial T_2 \\ \alpha_2 &\mapsto \beta_2 \\ \beta_2 &\mapsto \alpha_2\end{aligned}$$

Στη συνέχεια, ξανακολλάμε τους δύο τόρους με περιεχόμενο μαζί ταυτίζοντας τα σύνορά τους. Αυτό είναι ακόμα δυνατό αφού το $\phi(\partial T_2)$ είναι ακόμα ομοιομορφικό με το ∂T_1 . Αντί για τις προηγούμενες ταυτίσεις, δηλαδή αντί να κολλήσουμε το α_1 στο β_2 και το β_1 στο α_2 , τώρα ταυτίζουμε το α_1 με το $\phi(\beta_2)$, και με τον ίδιο τρόπο τα β_1 και $\phi(\alpha_2)$.

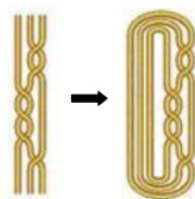
Το αποτέλεσμα είναι το εξής: κολλώντας το α_1 στο $\phi(\beta_2) = \alpha_2$ μας δίνει την S^2 επειδή ταυτίζουμε τα σύνορα δύο δίσκων. Και, αφού ταυτίζουμε το β_1 με το $\phi(\alpha_2) = \beta_2$, το κάνουμε αυτό για κάθε μεσημβρινό, δηλαδή γύρω από μία ολόκληρη παράλληλο, που είναι ομοιομορφικό με το S^1 . Η πολλαπλότητα που λαμβάνουμε με αυτόν τον τρόπο είναι το $S^2 \times S^1$. Έχουμε κάνει αυτό που λέγεται χειρουργική σε 3-πολλαπλότητες.

Παράδειγμα 1: Ο κρίκος boottomean αναπαριστά τον $T^3 = S^1 \times S^1 \times S^1$, υπό την έννοια ότι χειρουργική κατά μήκος του μας δίνει τον τρία τόρο.

1.7 Κοτσίδες

Η ομάδα κοτσίδων n κλωστών μίας συνεκτικής επιφάνειας S , $B_n(S)$, ορίζεται ως η θεμελιώδης ομάδα του χώρου των διαμορφώσεων μή διατεταγμένων n -άδων διαφορετικών σημείων στην S , $\pi_1(\text{Conf}(S, n)/\Sigma_n)$, όπου Σ_n συμβολίζει την ομάδα μεταθέσεων. Με αυτόν τον συμβολισμό η επιφάνεια που σχετίζεται με την κλασική ομάδα κοτσίδων του Artin, B_n , είναι ο δίσκος. Τα στοιχεία της B_n μπορούν να θεωρηθούν είτε ως αλγεβρικά ή τοπολογικά αντικείμενα, μία κοτσίδα n κλωστών είναι ομοιομορφική εικόνα n τόξων κατάλληλα εμφυτευμένα στην $S^2 \times [0, 1]$, μονοτονικά ως προς μία συνάρτηση ύψους.

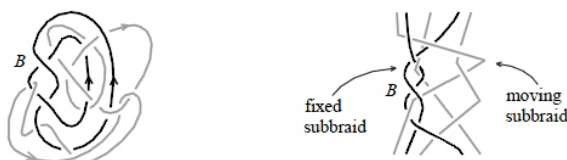
Οι κοτσίδες σχετίζονται με τους προσανατολισμένους κόμβους και κρίκους (δείτε την Εικόνα 1.22) οι οποίοι, αντίστοιχα, μπορούν να ισοτοπηθούν σε κλειστές κοτσίδες μέσω του Θεωρήματος Alexander [19]. Επιπλέον, από το Θεώρημα Markov, δύο κρίκοι είναι ισοτοπικοί αν και μόνο αν οι αντίστοιχες κοτσίδες διαφέρουν μέσω συζυγίας στην B_n , και μέσω θετικής και αρνητικής σταθεροποίησης: $\alpha \sim \alpha \sigma_n^{\pm 1}$, $\alpha \in B_n$ (όπου σ_i είναι η στοιχειώδης θετική διασταύρωση μεταξύ των i και $i + 1$ κλωστών).



Σχήμα 1.22: Το κλείσιμο μιας κοτσίδας σε κόμβο.

Η βασική κατασκευή του πολυωνύμου Jones 2 μεταβλητών, ή του πολυωνύμου HOMFLY-PT είναι, η αναπαράσταση της ομάδας κοτσίδων B_n στις άλγεβρες Hecke τύπου A , $H_n(q)$, εφαρμόζοντας το ίχνος Ocneanu και μετά αναπροσαρμόζοντας το ίχνος σύμφωνα με τις θετικές και αρνητικές σταθεροποιήσεις. Το πολυώνυμο Jones κατασκευάζεται με έναν παρόμοιο τρόπο αναπαραστώντας την B_n στην άλγεβρα Temperley-Lieb, TL_n .

Η ισοδυναμία κοτσίδων για κλασικούς κόμβους βασίζεται στην συζυγία της ομάδας κοτσίδων και τις κινήσεις σταθεροποίησης. Η Λαμπροπούλου και ο Rourke έδειξαν ότι όλες οι κινήσεις είναι ειδικές περιπτώσεις μίας πιο γενικής κίνησης, της κίνησης L [78]. Στο [78] οι έννοιες των *μικτών κρίκων* και *μικτών κοτσίδων* εισάγονται για να αναπαρασταθούν κρίκοι και κοτσίδες σε 3-πολλαπλότητες [78, 79, 51]. Αυτά αποτελούνται από δύο μέρη: το κινούμενο κομμάτι που αναπαριστά τον κρίκο στην 3-πολλαπλότητα και τον χειρουργικό κρίκο ή την χειρουργική κοτσίδα, που είναι σταθερά και αναπαραστών την 3-πολλαπλότητα στην S^3 , δείτε Εικόνα 1.23.



Σχήμα 1.23: Ένας μικτός κρίκος και μία μικτή κοτσίδα.

Κεφάλαιο 2

Διαπλοκή ανοικτών αλυσίδων

Σε αυτό το κεφάλαιο μελετάμε τις ιδιότητες του αριθμού περιέλιξης κατά Gauss για κλειστές και ανοικτές αλυσίδες. Στη συνέχεια, χρησιμοποιούμε το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss για να εκτιμήσουμε την αυξητική τάση του μέσου τετραγωνικού αριθμού συστροφής, Wr (Θεώρημα 2.6.2), του μέσου τετραγωνικού αριθμού περιέλιξης (Θεώρημα 2.6.4), του μέσου τετραγωνικού αριθμού αυτο-περιέλιξης, Sl (Θεώρημα 2.6.5), και του μέσου απόλυτου αριθμού περιέλιξης (Θεώρημα 2.6.7) ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων σε περιορισμένο χώρο σε σχέση με το μήκος τους, n . Επίσης παρουσιάζουμε αριθμητικά αποτελέσματα σε τυχαίους περιπάτους τα οποία επιβεβαιώνουν τις αναλυτικές μας προβλέψεις.

Ένα τήγμα πολυμερούς μπορεί να αποτελείται από κυκλικά πολυμερή (κλειστές αλυσίδες), γραμμικά πολυμερή (ανοικτές αλυσίδες), ή μία συλλογή από κυκλικά και γραμμικά πολυμερή. Οι πολυμερικές αλυσίδες είναι μακριά εύκαμπτα μόρια που επιβάλλουν τοπολογικά εμπόδια το ένα στο άλλο επειδή δεν μπορούν να διαπεράσουν το ένα το άλλο ([27, 115]). Αυτοί οι χωρικοί περιορισμοί, που λέγονται *τοπολογικοί περιορισμοί* (ΤΠ) ή *διαπλοκές*, επηρεάζουν την διαμόρφωση και την κίνηση των αλυσίδων σε ένα πολυμερικό τήγμα και έχουν μελετηθεί χρησιμοποιώντας διάφορα μοντέλα των διαπλοκών στα πολυμερή ([99, 132]). Ο Edwards πρότεινε να θεωρήσουμε ότι η τοπική αλληλεπίδραση μεταξύ των αλυσίδων περιορίζει την κίνησή τους σε μία σωληνοειδή περιοχή. Ο άξονας του σωλήνα είναι μία αδροποιημένη αναπαράσταση της αλυσίδας και ονομάζεται *πρωταρχικό μονοπάτι* [34]. Λόγω της απλότητάς του, το μοντέλο σωλήνα μας επιτρέπει να κάνουμε μία θεωρητική μελέτη και να περιγράψουμε τις δυναμικές και ρεολογικές ιδιότητες των πολυμερικών τηγμάτων [81, 59, 70, 115, 131]. Ωστόσο, μία ξεκάθαρη έκφραση της ακριβής σημασίας της διαπλοκής και το πώς μπορεί να μετρηθεί ο βαθμός της διαπλοκής παραμένει ένα άλυτο πρόβλημα.

Στη μαθηματική μελέτη των πολυμερών, συνήθως θεωρούμε διαμορφώσεις αλυσίδων χωρίς

αλληλεπιδράσεις μεταξύ των μονομερών που βρίσκονται μακριά κατά μήκος μίας αλυσίδας, ακόμα και εάν προσεγγίζουν το ένα το άλλο στον χώρο. Τέτοιες αλυσίδες λέγονται *ιδανικές αλυσίδες* [115]. Αυτή η κατάσταση δεν πραγματοποιείται ποτέ για πραγματικές αλυσίδες, αλλά υπάρχουν διάφοροι τύποι πολυμερικών συστημάτων με σχεδόν ιδανικές αλυσίδες. Σε μία ενδιάμεση θερμοκρασία, επονομαζόμενη θ -θερμοκρασία, οι αλυσίδες είναι σε σχεδόν ιδανικές διαμορφώσεις, επειδή οι ελκτικές και απωστικές δυνάμεις των μορίων ακυρώνουν η μία την άλλη. Επιπλέον, τα τμήματα γραμμικών πολυμερών και διαλυμάτων υψηλής θερμοότητας έχουν διαμορφώσεις σχεδόν ιδανικών αλυσίδων επειδή οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των μονομερών εξοντώνονται λόγω των γύρω αλυσίδων. Η διαμόρφωση μίας ιδανικής αλυσίδας χωρίς αλληλεπιδράσεις μεταξύ των μονομερών είναι το ουσιαστικό αρχικό σημείο των μοντέλων στην φυσική των πολυμερών. Κάθε δυνατή διαμόρφωση μίας ιδανικής αλυσίδας μπορεί να απεικονισθεί με έναν τυχαίο περίπατο. Άρα, τα στατιστικά στοιχεία των τυχαίων περιπάτων και των ιδανικών αλυσίδων είναι παρόμοια.

Από τα [28, 29, 105, 126] γνωρίζουμε ότι η πιθανότητα ένα πολύγωνο ή μία ανοικτή αλυσίδα με n ακμές στο κυβικό πλέγμα και στον 3-διάστατο χώρο να μην είναι πεπλεγμένη τείνει στο μηδέν καθώς το n τείνει στο άπειρο. Αυτό το αποτέλεσμα επιβεβαιώνει την υποθεση των Frisch-Wasserman-Delbruck ότι τα μακριά κυκλικά πολυμερή σε διάλυμα είναι πεπλεγμένα με μεγάλη πιθανότητα. Ένα πιο δυνατό θεώρημα είναι ότι η πιθανότητα ένας συγκεκριμένος τύπος κόμβου να εμφανίζεται σαν μέρος ενός τυχαίου περιπατου ή πολυγώνου τείνει στο 1 καθώς το n τείνει στο άπειρο. Ωστόσο, η πιθανότητα να διαμορφωθεί ένας συγκεκριμένος τύπος κόμβου τείνει στο μηδέν καθώς το n τείνει στο άπειρο ([139]). Η πιθανότητα τα πολυμερή να είναι πεπλεγμένα εξαρτάται επίσης από τους χωρικούς περιορισμούς στους οποίους υπόκεινται. Αυτό έχει μελετηθεί από τους [5, 130]. Για παράδειγμα, τα μόρια DNA περιορισμένα σε ιούς έχουν πολύ μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι πεπλεγμένα. Επιπλέον, η κατανομή των τύπων κόμβων είναι διαφορετική από την κατανομή του DNA σε διάλυμα ([3, 137]).

Τα πολυμερή σε διάλυμα είναι εύκαμπτα μόρια, έτσι οι ανοικτές πολυμερικές αλυσίδες μπορούν να απομακρυνθούν, τουλάχιστον σε μεγάλες κλίμακες χρόνου. Έτσι, ο ορισμός της διαπλοκής πρέπει να ανφέρεται σε σταθερές διαμορφώσεις στον χώρο, και, άρα, δεν επιτρέπουν την χρήση της έννοιας της τοπολογικής αναλλοίωτης. Σε αντίθεση, για κλειστές πολυμερικές αλυσίδες, η διαπλοκή τους δεν αλλάζει υπό συνεχείς παραμορφώσεις που δεν επιτρέπουν το σπάσιμο των αλυσίδων ή στην μία αλυσίδα να διαπεράσει μέσα από την άλλη. Για να χαρακτηρίσουμε την διαπλοκή των ανοικτών αλυσίδων μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο DMS ([92, 93]) για να καθορίσουμε το φάσμα και την κατανομή των τύπων κόμβων, που δημιουργούνται κλείνοντας τις ανοικτές αλυσίδες σε μία "σφαίρα στο άπειρο". Οι τύποι κόμβων που προκύπτουν μπορούν να αναλυθούν χρησιμοποιώντας, για παράδειγμα, τα πολυώνυμα Jones ή HOMFLYPT.

Στην παράγραφο 2.1 παρουσιάζουμε ένα κλασικό μέτρο διαπλοκής, τον αριθμό περιέλιξης

κατά Gauss, ο οποίος είναι μία κλασική τοπολογική αναλλοίωτη στην περίπτωση κυκλικών πολυμερών. Για ζεύγη ανοικτών ή μικτών αλυσίδων, στην παράγραφο 2.5 θα δείξουμε ότι αυτή η ποσότητα είναι ένας πραγματικός αριθμός, που είναι χαρακτηριστικός της διαμόρφωσης, αλλά αλλάζει συνεχώς υπό συνεχείς παραμορφώσεις των αλυσίδων. Άρα, η εφαρμογή του αριθμού περιέλιξης κατά Gauss σε ανοικτές αλυσίδες δεν είναι τοπολογική αναλλοίωτη, αλλά εξαρτάται από την γεωμετρία των αλυσίδων. Αυτό το μέτρο είναι πολύ ευαίσθητο στις διαμορφώσεις [1, 15, 74, 75]. Για ζεύγη ‘παγωμένων’ ανοικτών πολυμερικών αλυσίδων, θα δούμε ότι το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss μπορεί να εφαρμοσθεί για να υπολογίσει έναν μέσο αριθμό περιέλιξης. Με παρόμοιο τρόπο, το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss μπορεί να εφαρμοσθεί την συστροφή και τον αριθμό αυτο-περιέλιξης μίας ‘παγωμένης’ διαμόρφωσης μίας ανοικτής αλυσίδας.

Σε σχέση με τις κατά μέσο όρο ιδιότητες των πολυμερών σε διάλυμα, θα μελετήσουμε την μέση τιμή αυτών των ιδιοτήτων στον χώρο των δυνατών διαμορφώσεων. Η βιβλιογραφία δείχνει ότι για τα πειράματα, την θεωρία και την προσομοίωση, ο Μέσος Αριθμός Διασταυρώσεων (ΜΑΔ) είναι η κύρια ποσότητα που χρησιμοποιείται από τους ερευνητές [7, 8, 9, 30, 31, 34, 43, 113, 119, 121]. Αυτό δεν είναι ούτε τοπολογικό ούτε γεωμετρικό χαρακτηριστικό, καθώς εξαρτάται από την συγκεκριμένη διαμόρφωση, και αλλάζει υπό συνεχείς παραμορφώσεις [47]. Υπό μία έννοια, ο αριθμός περιέλιξης είναι ένα πιο δυνατό μέτρο διαπλοκής από τον ΜΑΔ [3, 4, 5, 11, 14, 18, 20, 26, 35, 36, 45, 55, 56, 57, 59, 66, 68, 72, 82, 85, 86, 88, 89, 98, 99, 100, 111, 114, 122, 125, 135, 136, 138].

2.1 Αριθμός περιέλιξης

Έστω δύο προσανατολισμένες καμπύλες στο χώρο l_1, l_2 με παραμετροποιήσεις $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$. 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. 2.1 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 .

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

όπου c_i διασταυρώσεις μεταξύ των l_1, l_2 .

Έστω τώρα παραμετροποιήσεις 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



Σχήμα 2.1: (α) Διασταύρωση με πρόσημο +1 και (β) διασταύρωση με πρόσημο -1

κάθε (t, s) μπορούμε να αντιστοιχίσουμε το μοναδιαίο διάνυσμα $\Gamma(t, s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|} = \vec{\xi}$ πάνω στην ευθεία των σημείων $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$. Εάν θεωρήσουμε την προβολή κάθετη στο $\vec{\xi} = \Gamma(t, s)$, το πλήθος των διπλών σημείων της προβολής θα είναι όσο το πλήθος των ζευγαριών (t_i, s_i) για τα οποία $\Gamma(t, s) \parallel \vec{\xi}$ ή $\Gamma(t, s) \parallel -\vec{\xi}$, δηλαδή θα είναι ίσο με την πληθικότητα του συνόλου $\Gamma^{-1}(\vec{\xi}) \cup \Gamma^{-1}(-\vec{\xi})$, Σχήμα 2.2.

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 από 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 :

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

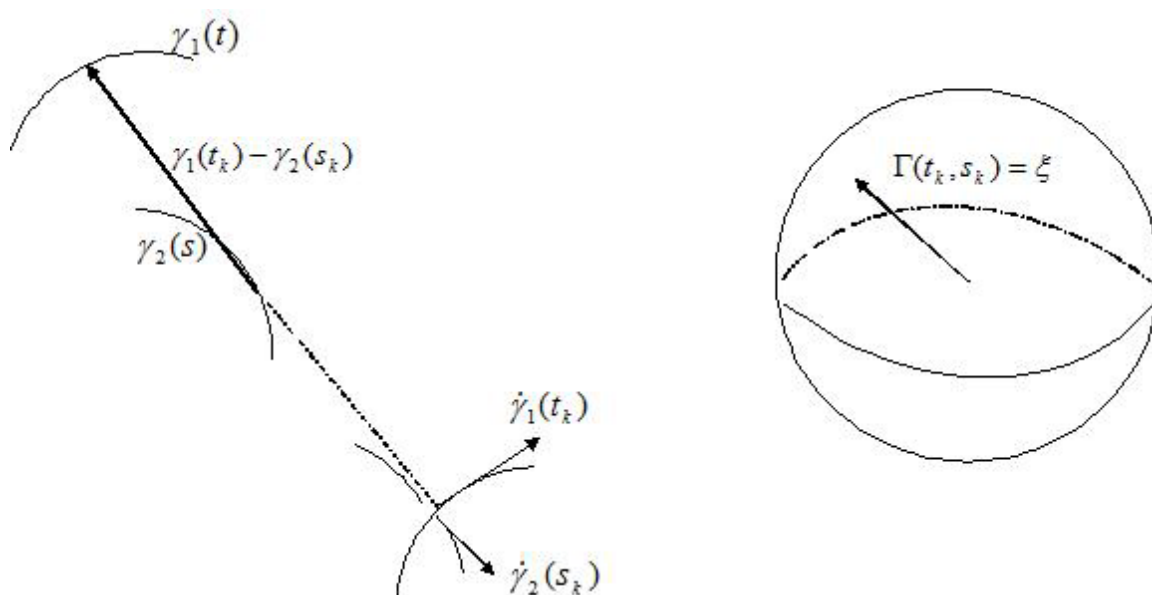
όπου p_{ξ} , η γεωμετρική πιθανότητα να επιλέξουμε το διάνυσμα $\vec{\xi}$ της S^2 , είναι $p_{\xi} = \frac{A_{\xi}}{A}$ όπου A_{ξ} είναι το εμβαδόν της επιφάνειας A_{ξ} της διαμέρισης και A το εμβαδόν της S^2 . Άρα,

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

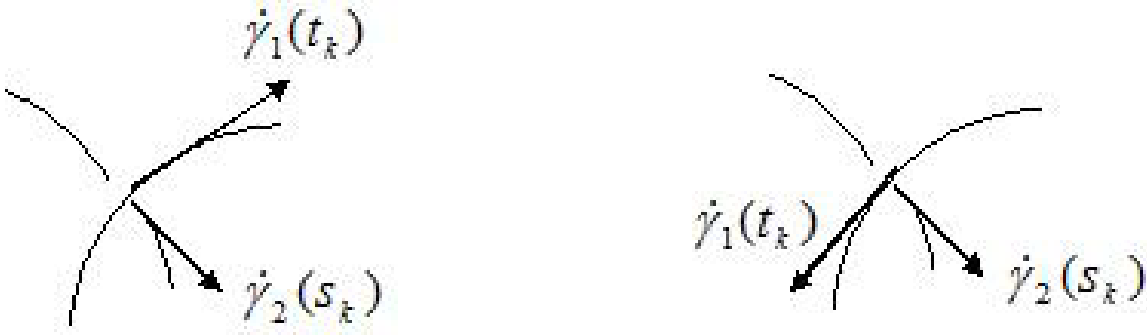
Για ακολουθία διαμερίσεων δ_n της S^2 τέτοια ώστε $\mu(\delta_n) \rightarrow 0$ παίρνουμε το όριο της παραπάνω σχέσης

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

Αυτό είναι το επιφανειακό ολοκλήρωμα



Σχήμα 2.2: Στο κάθε (t, s) μπορούμε να αντιστοιχίσουμε το μοναδιαίο διάνυσμα $\Gamma(t, s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|} = \vec{\xi}$ πάνω στην ευθεία των σημείων $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$. Εάν θεωρήσουμε την προβολή κάθετη στο $\vec{\xi} = \Gamma(t, s)$, το πλήθος των διπλών σημείων της προβολής θα είναι ίσο με την πληθικότητα του συνόλου $\Gamma^{-1}(\vec{\xi}) \cup \Gamma^{-1}(-\vec{\xi})$.



Σχήμα 2.3: 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.

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

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 $(s, t) \in \Gamma^{-1}(\vec{\xi}) \cup \Gamma^{-1}(-\vec{\xi})$ 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 $\frac{|\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)|}{|\dot{\gamma}_1(t) - \dot{\gamma}_2(s)|^2} = |\sin(\widehat{\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s)})|$. Άρα, το εμβαδόν A_{ξ} γράφεται συναρτήσεως 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 2.3.

Άρα,

$$\begin{aligned}
E[lk_\xi(l_1, l_2)] &= \frac{1}{8\pi} \sum_{\xi \in \delta_m} \sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(\xi) \cup \Gamma^{-1}(-\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \\
&= \frac{1}{8\pi} \sum_{\xi \in \delta_m} \left(\sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \right. \\
&\quad \left. + \sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(-\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \right) \quad (2.7) \\
&= \frac{1}{8\pi} 2 \sum_{\xi \in \delta_m} \left(\sum_{(s,t) \in \Gamma^{-1}(\xi)} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^2} \Delta s \Delta t \right) \\
&= \frac{1}{4\pi} \sum_{(s,t) \in D_m} \Gamma(s, t) \cdot \frac{\dot{\gamma}_1(t) \times \dot{\gamma}_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^2} \Delta s \Delta t
\end{aligned}$$

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 2.1.1 (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

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

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 2.1.2. (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.

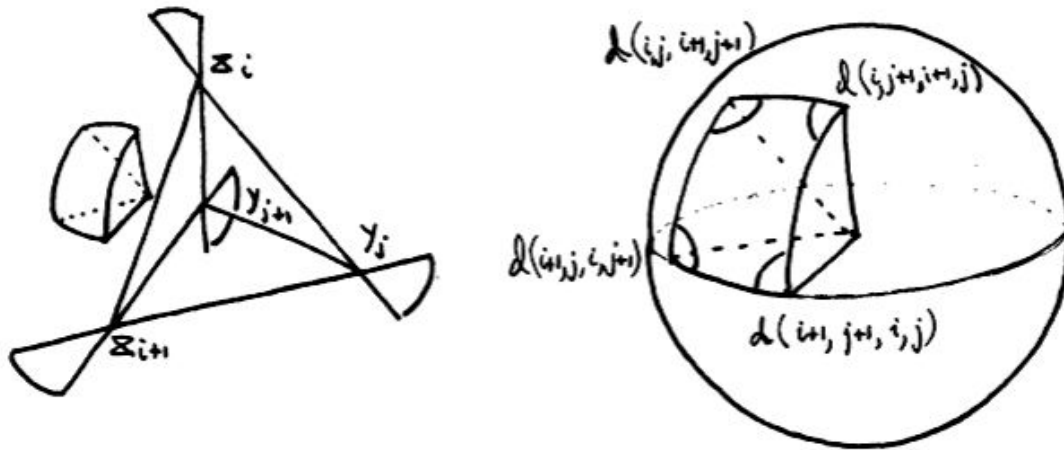
(ii) Για δύο κλειστές καμπύλες ο αριθμός περιέλιξης μπορεί να εκφραστεί σαν τον βαθμό της απεικόνισης $\Gamma(t, s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|}$ από τον τόρο στην σφαίρα.

Ιδιότητες του αριθμού περιέλιξης

Ο αριθμός περιέλιξης δύο προσανατολισμένων καμπυλών έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

- (i) Ο παραπάνω ορισμός του $L(l_1, l_2)$ είναι ανεξάρτητος από το επίπεδο προβολής των l_1 και l_2 ανεξάρτητα από το εάν αυτές είναι ανοικτές ή κλειστές.
- (ii) Για κλειστές αλυσίδες, ο $L(l_1, l_2)$ είναι ένας ακέραιος και ισούται με το μισό αλγεβρικό άθροισμα των διασταυρώσεων των προβολών των δύο καμπυλών σε οποιοδήποτε επίπεδο.
- (iii) Για ανοικτές αλυσίδες, ο $L(l_1, l_2)$ είναι ένας πραγματικός αριθμός και ισούται με την μέση τιμή του μισού αλγεβρικού αθροίσματος των προβολών των δύο καμπυλών ως προς όλα τα δυνατά επίπεδα προβολής.
- (iv) Ο $L(l_1, l_2)$ είναι ανεξάρτητος από τον προσανατολισμό των δύο καμπυλών (Για δύο τυχαίες καμπύλες, ο $L(l_1, l_2)$ αλλάζει πρόσημο εάν αλλάξει ο προσανατολισμός της μίας εκ των δύο καμπυλών.)

Παρατήρηση 2.1.3. Για κλειστές αλυσίδες ο αριθμός περιέλιξης είναι αναλλοίωτος υπό συνεχείς παραμορφώσεις των καμπυλών όταν αυτές δεν επιτρέπεται να διαπεράσουν η μία την άλλη. Παρατηρούμε όμως ότι παραμένει αναλλοίωτος υπό παραμορφώσεις που επιτρέπουν σε μία καμπύλη να διαπεράσει τον εαυτό της.



Σχήμα 2.4: 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 [10].

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. 2.4). Ο αριθμός περιέλιξής τους τότε είναι

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

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 $\vec{\xi} \in S^2$ και είναι ίση με το πηλίκο του προσανατολισμένου εμβαδού δύο αντιδιαμετρικών στερεών γωνιών προς το εμβαδό όλης της σφαίρας [10]. 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 $n=4$

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

Δηλαδή το εμβαδό αυτό μπορεί να εκφραστεί σε όρους των γωνιών του σφαιρικού πολυγώνου, και κάθε τέτοια γωνία είναι μία διέδρη γωνία του τετραέδρου με κορυφές $X_0X_1Y_0Y_1$. Θέτουμε $d(i, j, k, l) = \eta$ διέδρη γωνία από το τρίγωνο $X_iX_kY_j$ προς το τρίγωνο $X_iY_jY_l$ στην ακμή X_iY_j . Τότε έχουμε

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

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

Παρατήρηση 2.1.4. 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).

Σύνδεση με τον ηλεκτρομαγνητισμό

Στην περίπτωση κλειστών καμπυλών, μπορούμε να δώσουμε μία ακόμα εφαρμογή του αριθμού περιέλιξης. Στην πραγματικότητα, ο τύπος του ολοκληρώματος του Gauss εμφανίστηκε για πρώτη φορά στον τόμο των Έργων που είχε ως θέμα τον ηλεκτρομαγνητισμό [112].

Έστω ένα σύρμα από το οποίο περνά ηλεκτρικό ρεύμα. Από τον νόμο του Biot-Savart γνωρίζουμε ότι το μαγνητικό πεδίο που δημιουργείται σε ένα σημείο λόγω του σύρματος είναι

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} I \oint_{wire} \frac{d\vec{l} \times \vec{r}}{r^3}. \tag{2.14}$$

Τότε από τις εξισώσεις του Maxwell έχουμε $div \vec{B} = 0$, και $rot \vec{B} = \mu_0 \vec{J}$, και χρησιμοποιώντας το Θεώρημα του Stokes, μπορούμε να υπολογίσουμε το μαγνητικό πεδίο σε μία κλειστή καμπύλη c η οποία είναι το σύνορο μίας επιφάνειας την οποία το σύρμα τέμνει μία φορά:

$$\begin{aligned} \oint \vec{B} \cdot d\vec{s} = \mu_0 I &\Rightarrow \frac{1}{4\pi} \oint \oint_{wire} \frac{d\vec{I} \times \vec{r}}{|\vec{r}|^3} \cdot d\vec{s} = 1 \\ &\Rightarrow \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt = 1 = L(loop, wire), \end{aligned} \quad (2.15)$$

όπου $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ είναι οι παραμετροποιήσεις της καμπύλης και του σύρματος.

Για ένα σωληνοειδές που αποτελείται από N στροφές του σύρματος

$$\Rightarrow \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt = N = L(loop, solenoid). \quad (2.16)$$

2.2 Μέσος αριθμός διασταυρώσεων

Στο [43] δείχνεται ότι ο μέσος αριθμός διασταυρώσεων $a(l_1, l_2)$ μεταξύ δύο ακμών l_1 και l_2 δίνεται από

$$a(l_1, l_2) = \frac{1}{4\pi} \int_s \int_t \frac{|(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))|}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds, \quad (2.17)$$

όπου γ_1 και γ_2 είναι οι παραμετροποιήσεις 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 [30]

$$\chi_n = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} a(l_i, l_j) \quad (2.18)$$

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 [30]

$$\chi'_n = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n} a(l_i, l'_j) \quad (2.19)$$

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

2.3 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

$$wr(K_\xi) = \sum_{c_i} sign(c_i) \quad (2.20)$$

όπου c_i διασταύρωση του K_ξ .

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 χαρακτηριστικά 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 2.3.1. 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 [46]

$$Wr(l) = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]^*} \int_{[0,1]^*} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds \quad (2.21)$$

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

$$\begin{aligned} Wr(\bar{X}) &= \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \end{aligned} \quad (2.22)$$

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 [15]:

- (i) το $Wr(l)$ ισούται τον μέσο αλγεβρικό αριθμό διασταυρώσεων της καμπύλης με τον εαυτό ως προς όλες τις δυνατές προβολές.
- (ii) το $Wr(l)$ είναι ανεξάρτητο του προσανατολισμού της καμπύλης.

2.4 Αριθμός αυτοπεριέλιξης

Ορισμός 2.4.1. Ο αριθμός αυτοπεριέλιξης (*self-linking number*) μίας προσανατολισμένης καμπύλης l , της οποίας η παραμετρικοποίηση είναι $\gamma(t)$, ορίζεται 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 [10],

$$SL(l) = \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]^*} \int_{[0,1]^*} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds + \int_{[0,1]} \frac{(\gamma'(t) \times \gamma''(t)) \cdot \gamma'''(t)}{|\gamma'(t) \times \gamma''(t)|^2} dt, \quad (2.23)$$

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 παραμετρικοποίηση του μήκους τόξου του οποίου είναι γ , μπορούμε να το εκφράσουμε το $SL(\bar{X})$ ως

$$\begin{aligned}
SL(\bar{X}) &= \frac{1}{4\pi} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(s), \gamma(t) - \gamma(s))}{|\gamma(t) - \gamma(s)|^3} dt ds \\
&+ \int_{[0,1]} \frac{(\gamma'(t) \times \gamma''(t)) \cdot \gamma'''(t)}{|\gamma'(t) \times \gamma''(t)|^2} dt \Leftrightarrow \\
SL(\bar{X}) &= \frac{1}{4\pi} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \\
&+ \int_{[0,1]} \frac{(\gamma'(t) \times \gamma''(t)) \cdot \gamma'''(t)}{|\gamma'(t) \times \gamma''(t)|^2} dt
\end{aligned} \tag{2.24}$$

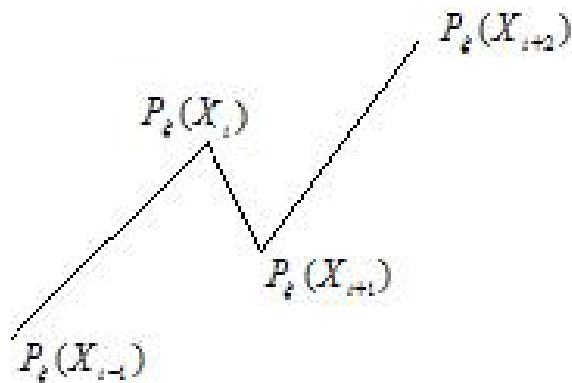
όπου $l_i(t) = (t-1)X_{i-1} + tX_i$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X_{i-1}X_i$, $l_j(s) = (s-1)X_{j-1} + sX_j$ είναι η παραμετρικοποίηση της ακμής $X_{j-1}X_j$, και $\dot{l}_i(t) = X_{i-1} + X_i$, $\dot{l}_j(s) = X_{j-1} + X_j$.

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 $\vec{T}_i = \frac{X_{i+1} - X_i}{\|X_{i+1} - X_i\|}$ το μοναδιαίο εφαπτόμενο διάνυσμα στην κατεύθυνση της στής ακμής. Θέτουμε $\vec{B}_i = \frac{\vec{T}_{i-1} \times \vec{T}_i}{\|\vec{T}_{i-1} \times \vec{T}_i\|}$ να είναι το μοναδιαίο δικάθετο διάνυσμα στο προσανατολισμένο επίπεδο που περιέχει τις δύο ακμές του X στο X_i . Τα διανύσματα \vec{B}_i και \vec{B}_{i+1} είναι ορθογώνια στο \vec{T}_i άρα το $\vec{B}_i \times \vec{B}_{i+1}$ είναι πολλαπλάσιο του \vec{T}_i . Θέτουμε $f_i(X) = \pm 1$ ανάλογα με το πρόσημο του $\vec{B}_i \times \vec{B}_{i+1} \cdot \vec{T}_i$, αποδίδοντας το εάν η i -οστή ακμή έχει αρνητική ή θετική στρέψη. Η γωνία στρέψης $\phi_i(X)$ είναι η προσημασμένη γωνία από το \vec{B}_i στο \vec{B}_{i+1} στο προσανατολισμένο επίπεδο που είναι κάθετο στο \vec{T}_i .

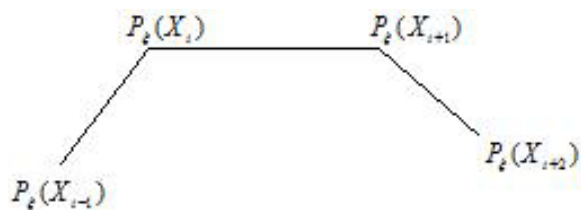
Για κάθε σημείο ξ της S^2 , θέτουμε P_ξ την ορθογώνια προβολή του πολυγώνου. Εάν τα $P_\xi(X_{i-1})$ και $P_\xi(X_{i+2})$ κείτονται σε απέναντι πλευρές της γραμμής ανάμεσα των $P_\xi(X_i)$ και $P_\xi(X_{i+1})$, και θέτουμε $F_i(X, \xi) = f_i(X)$ στην πρώτη περίπτωση και $F_i(X, \xi) = 0$ αλλιώς, σχήματα 2.5, 2.6.

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

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 $\vec{\xi}$ και $-\vec{\xi}$ με κέντρο το μέσο της ακμής κείται μέσα στην σφήνα. Το εμβαδόν της απράχτου πάνω στη σφαίρα είναι ίσο με (δίεδρη γωνία της σφήνας στην $X_i X_{i+1}$) $\frac{4\pi}{2\pi}$.



Σχήμα 2.5: Τα $P_\xi(X_{i-1})$ και $P_\xi(X_{i+2})$ κείτονται 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 2.6: Τα $P_\xi(X_{i-1})$ και $P_\xi(X_{i+2})$ κείτονται στην ίδια πλευρά της γραμμής ανάμεσα των $P_\xi(X_i)$ και $P_\xi(X_{i+1})$, και θέτουμε $F_i(X, \xi) = 0$

Άρα η πιθανότητα η προβολή της ακμής $X_i X_{i+1}$ του πολυγώνου X ως προς τυχαίο διάνυσμα $\vec{\xi}$ πάνω στη σφαίρα, $P_{\xi}(X)$, να είναι μία ακμή ανάκλασης είναι ίση με 2·εμβαδόν ατράκτου που ορίζει η σφήνα. Συμπεραίνουμε ότι $\int_{\xi \in S^2} F_i(X, \xi) dA = 4F(X_i)$ ·(δίδεδρη 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 δίδεδρη γωνία είναι ακριβώς η προσημασμένη γωνία $\phi_i(X)$ μεταξύ των διανυσμάτων \vec{B}_i και \vec{B}_{i+1} , και άρα

$$\int_{[0,1]} \tau(t) dt = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{2} \int_{\xi \in S^2} \sum_i F_i(X, \xi) dA = \frac{1}{2\pi} \sum_i \phi_i(X) \quad (2.25)$$

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:

- (i) το $SL(l)$ είναι ένας ακέραιος αριθμός και 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.

2.5 Παραμορφώσεις στο χώρο

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 ισοτοπίας, 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 $2(\frac{1}{2}n(n-3)) + n^2$ 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

$$\begin{aligned} (v_{i+1} - v_i) \times (w_j - v_i) \cdot (w_{j+1} - v_i) &= 0 \\ (v_{i+1} - v_i) \times (w_j - v_i) \cdot (v_{i+1} - v_i) \times (w_{j+1} - v_i) &< 0 \\ (w_{j+1} - w_j) \times (v_i - w_j) \cdot (w_{j+1} - w_j) \times (v_{i+1} - w_j) &< 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

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 2.5.1. *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 2.5.4 θα χρειαστούμε το παρακάτω θεώρημα από την ανάλυση.

Θεώρημα 2.5.2. *Εάν η συνάρτηση $f(x, t)$ είναι συνεχής στο διάστημα $\Delta = J \times [a, b]$, τότε η συνάρτηση*

$$F(x) = \int_{[a,b]} f(x, t) dt \quad (2.27)$$

είναι συνεχής στο J , όπου J ένα διάστημα.

Απόδειξη του Θεωρήματος 2.5.4. 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

$$L(X, Y) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \quad (2.28)$$

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

$$l(e_i, e_j) = \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}_i(t), \dot{l}_j(s), l_i(t) - l_j(s))}{|l_i(t) - l_j(s)|^3} dt ds \quad (2.29)$$

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 :

$$l(e_i, e_j) = \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{\begin{vmatrix} A_1 & A_2 & A_3 \\ X_i^{(1)} - X_{i-1}^{(1)} & X_i^{(2)} - X_{i-1}^{(2)} & X_i^{(3)} - X_{i-1}^{(3)} \\ Y_j^{(1)} - Y_{j-1}^{(1)} & Y_j^{(2)} - Y_{j-1}^{(2)} & Y_j^{(3)} - Y_{j-1}^{(3)} \end{vmatrix}}{|tX_i + (1-t)X_{i-1} - sY_j - (1-s)Y_{j-1}|^3} dt ds \quad (2.30)$$

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

$$\begin{aligned} l(e_i, e_j) &= \sum_{0 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) \\ &= \sum_{1 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) \\ &= \sum_{1 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) \\ &= \sum_{1 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}}{|tX_k + (1-t)X_{k-1} - sY_j - (1-s)Y_{j-1}|^3} dt ds \\ &= \sum_{1 \leq m \leq 3} p_m(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j) \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)}}{(\sum_{1 \leq m \leq 3} (tX_i^{(m)} + (1-t)X_{i-1}^{(m)} - sY_j^{(m)} - (1-s)Y_{j-1}^{(m)})^2)^{\frac{3}{2}}} dt ds \end{aligned} \quad (2.31)$$

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 2.5.2 $f_1(X_{i-1}, X_i, Y_{j-1}, Y_j, s) = \int_{[0,1]} f dt$ είναι συνεχής στο $\Omega_1 \times [0, 1]$. Εφαρμόζοντας πάλι το Θεώρημα 2.5.2 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. \square

Ορισμός 2.5.3. 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 2.5.4. *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 περιέλιξης τους τότε είναι

$$L(X', Y') = \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(l'_i(t), l'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \quad (2.32)$$

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,

$$\begin{aligned} L(X', Y') &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}'_i(t), \dot{l}'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c_{ij} \text{Area of } Q(i', i + 1', j', j + 1') \end{aligned} \quad (2.33)$$

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

$$\begin{aligned} |L(X, Y) - L(X', Y')| &= \left| \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c_{ij} \text{Area of } Q(i, i + 1, j, j + 1) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c'_{ij} \text{Area of } Q(i', i + 1', j', j + 1') \right| \\ &= \left| \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq n} c_{ij} (\text{Area of } Q(i, i + 1, j, j + 1) \right. \\ &\quad \left. - c'_{ij} \text{Area of } Q(i', i + 1', j', j + 1') \right| \end{aligned} \quad (2.34)$$

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 $X'_k X'_{k+1}$, $X_k X_{k+1}$.

$$\begin{aligned} |L(X, Y) - L(X', Y')| &= \frac{1}{4\pi} \left| \sum_{0 \leq j \leq n} c_{k-1, j} \text{Area of } Q(k-1, k, j, j+1) \right. \\ &\quad \left. - c'_{k-1, j} \text{Area of } Q(k-1', k', j', j+1') \right. \\ &\quad \left. + \sum_{0 \leq j \leq n} c_{k, j} \text{Area of } Q(k, k+1, j, j+1) \right. \\ &\quad \left. - c'_{k, j} \text{Area of } Q(k', k+1', j', j+1') \right| \end{aligned} \quad (2.35)$$

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

$$\begin{aligned} Q(k', k + 1', j, j + 1) &= -2\pi + d(k', j, k + 1', j + 1) + d(k + 1', j, k', j + 1) \\ &\quad + d(k + 1', j + 1, k', j) + d(k', j + 1, k + 1', j) \end{aligned} \quad (2.36)$$

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

$$|L(X, Y) - L(X', Y')| < \frac{1}{4\pi} 2n \frac{8\pi\delta}{\alpha} = \frac{8n\delta}{\alpha} = \epsilon. \quad (2.37)$$

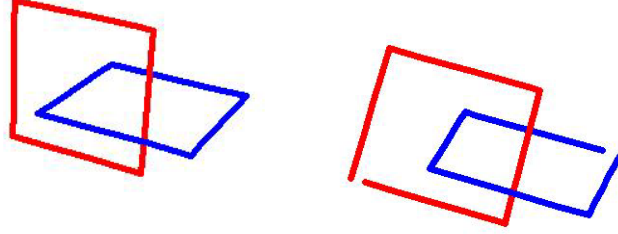
□

Πόρισμα 2.5.5. 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.

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. 2.7. 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



Σχήμα 2.7: 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 $L(X, Y) = 0.985497$

$$L(\bar{X}, \bar{Y}) = 1 \quad (2.38)$$

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

$$L(X, Y) = \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq 3} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}'_i(t), \dot{l}'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \quad (2.39)$$

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,

$$\begin{aligned} L(X, Y) &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq 3} \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} \frac{(\dot{l}'_i(t), \dot{l}'_j(s), l'_i(t) - l'_j(s))}{|l'_i(t) - l'_j(s)|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{0 \leq i, j \leq 3} c_{ij} \text{Area of } Q(i', i+1', j', j+1') \end{aligned} \quad (2.40)$$

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

$$Q(i, i+1, j, j+1) = -2\pi + d(i, j, i+1, j+1) + d(i+1, j, i, j+1) + d(i+1, j+1, i, j) + d(i, j+1, i+1, j) \quad (2.41)$$

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

$$n_1 = \frac{r_{i,j} \times r_{i,j+1}}{|r_{i,j} \times r_{i,j+1}|}, n_2 = \frac{r_{i,j+1} \times r_{i+1,j+1}}{|r_{i,j+1} \times r_{i+1,j+1}|}, n_3 = \frac{r_{i+1,j+1} \times r_{i+1,j}}{|r_{i+1,j+1} \times r_{i+1,j}|}, n_4 = \frac{r_{i+1,j} \times r_{i,j}}{|r_{i+1,j} \times r_{i,j}|} \quad (2.42)$$

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' όψη τον αμοιβαίο τους προσανατολισμό [68], έχουμε:

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

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

κλπ.

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

$$Q(i, i+1, j, j+1) = \arcsin(n_1 n_2) + \arcsin(n_2 n_3) + \arcsin(n_3 n_4) + \arcsin(n_4 n_1) \quad (2.43)$$

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

$$L(X, Y) = 0.985497. \quad (2.44)$$

Παρατήρηση 2.5.6. Ο αριθμός συστροφής δεν είναι αναλλοίωτη ιστοτοπίας 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 ισοτοπία (όπου μία μή εκφυλισμένη ισοτοπία εννοούμε μία ισοτοπία 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 $SL(l) = Lk(l_1, l_e)$. 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

$$Lk(R) = Tw(R) + Wr(R) \quad (2.45)$$

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

2.6 Ομοιόμορφοι τυχαίοι περίπατοι σε περιορισμένο χώρο

Οι πολυμερικές αλυσίδες προσομοιώνονται χρησιμοποιώντας ανοικτές ή κλειστές πολυγωνικές καμπύλες. Υπάρχουν διάφορα μοντέλα τυχαίων περιπάτων ή πολυγώνων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν και που είναι αντιπροσωπευτικά των ιδιοτήτων των διαφορετικών πολυμερικών τμημάτων [97, 71]. Σε αυτή την παράγραφο, θα επικεντρώσουμε την μελέτη μας στους ομοιόμορφους τυχαίους περιπάτους σε περιορισμένο χώρο καθώς μας παρέχουν ένα απλοποιημένο μοντέλο της θεωρητικής μας μελέτης και έχουν παρόμοια συμπεριφορά με άλλα μοντέλα πολυμερών.

Οι ομοιόμορφοι τυχαίοι περίπατοι παράγονται σύμφωνα με το μοντέλο URP, που εισήγαγε ο Millett [91]. Σε αυτό το μοντέλο δεν υπάρχουν σταθερά μήκη δεσμών και κάθε συντεταγμένη μίας κορυφής λαμβάνεται από το $C = [0, 1]$ σύμφωνα με την ομοιόμορφη κατανομή.

Αφού ένα τμήμα πολυμερούς μπορεί να λάβει διαφορετικές διαμορφώσεις στον χώρο κατά ένα χρονικό διάστημα, ενδιαφερόμαστε σε ένα μέτρο διαπλοκής που θα είναι ανεξάρτητο από μία συγκεκριμένη διαμόρφωση, και χαρακτηριστικό του χώρου διαμορφώσεων. Το παρακάτω θεώρημα αποδείχθηκε από τους Arsuaga et. al. ([4]).

Θεώρημα 2.6.1. *Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης δύο προσανατολισμένων ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων X και Y με n ακμές, που το καθένα περιέχεται στο C^3 , είναι $\frac{1}{2}n^2q$ όπου $q > 0$. Ένα παρόμοιο αποτέλεσμα ισχύει εάν το C^3 αντικαταστεί από ένα συμμετρικό κυρτό χωρίο του \mathbb{R}^3 .*

Το παραπάνω αποτέλεσμα είναι ανεξάρτητο του προσανατολισμού των δύο τυχαίων πολυγώνων. Λόγω του βάρους που δίνει ο τετραγωνισμός σε μεγαλύτερες τιμές του αριθμού περιέλιξης, ο μέσος απόλυτος αριθμός περιέλιξης είναι ένα πιο αντιπροσωπευτικό μέτρο της μέσης διαπλοκής του συστήματος.

2.6.1 Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός συστροφής ενός ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου σε περιορισμένο χώρο

Σε αυτή την παράγραφο, μελετάμε την συστροφή ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων (ή πολυγώνων) στον C^3 .

Ενδιαφερόμαστε στον ορισμό της μέσης τετραγωνικής συστροφής ενός ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου με n ακμές σε περιορισμένο χώρο ως προς όλες τις δυνατές διαμορφώσεις. Ο χώρος των διαμορφώσεων σε αυτήν την περίπτωση είναι ο $\Omega = [0, 1]^{3(n+1)} \setminus N$, όπου N είναι το σύνολο των διαμορφώσεων με αυτοτομές. Τότε το N έχει μέτρο μηδέν ([109, 110]).

Εργαζόμενοι όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 2.6.1 στο [4] θα αποδείξουμε και θα δείξουμε αριθμητικά το παρακάτω θεώρημα που αφορά την ασυμπτωτική τάση της μέσης τετραγωνικής συστροφής ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου.

Θεώρημα 2.6.2. *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 της αντίστοιχης απόδειξης στο [4], 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 l'_2 .

Λήμμα 2.6.3. (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, 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 αναμειγμένα 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.

Απόδειξη. (1) Είναι προφανές αφού ϵ_1 και ϵ_2 είναι ανεξάρτητες τυχαίες μετα-βλητές 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 επιχειρήμα 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 mod 6):

$$\begin{aligned}
 V\left(\sum_{1 \leq i < j \leq 6, 2 \leq |i-j| \leq 4} \epsilon_{ij}\right) &= E\left(\left(\sum_{1 \leq i < j \leq 6, 2 \leq |i-j| \leq 4} \epsilon_{ij}\right)^2\right) \\
 &= \sum_{1 \leq i < j \leq 6, 2 \leq |i-j| \leq 4} E(\epsilon_{ij}^2) + 2 \sum_{1 \leq i \leq 6} \sum_{i+2 \leq j \leq i+3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i(j+1)}) \\
 &\quad + 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq 6, |i-j|=3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i+1, j+1}) \\
 &\quad + 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq 6, |i-j|=2} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i-1, j+1}) \\
 &\quad + 2 \sum_{1 \leq i \leq 6} E(\epsilon_{i(i+2)}\epsilon_{i+1, i+3})
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

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

$$V\left(\sum_{1 \leq i, j \leq 6} \epsilon_{ij}\right) = 9 \cdot 2p + 2(12 \cdot u + 6 \cdot v + 6 \cdot w) = 6(3p + 2(2u + v + w)). \tag{2.47}$$

Αφού $V(\sum_{1 \leq i, j \leq 6} \epsilon_{ij}) > 0$, 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. 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 μίας 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 2.6.2. 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 2.6.3, είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι η μέση τιμή της συστροφής ενός διαγράμματος του P_n ως προς τον χώρο των δυνατών διαμορφώσεων Ω είναι

$$\begin{aligned}
& E\left(\sum_{1 \leq i < j \leq n, |i-j| \geq 2} \epsilon_{ij}^2\right) = \\
& = \sum_{1 \leq i < j \leq n, 2 \leq |i-j| \leq n-1} E(\epsilon_{ij}^2) + 2 \sum_{1 \leq i \leq n} \sum_{i+1 \leq j \leq i+n-3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i,j+1}) \\
& + 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq 6, 3 \leq |i-j| \leq n-3} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i+1, j+1}) \\
& + 2 \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n, 2 \leq |i-j| \leq n-4} E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i-1, j+1}) \\
& 2 \sum_{1 \leq i \leq n} E(\epsilon_{i, i+2}\epsilon_{i+1, i+3}) \\
& = n^2(p + 2(u + v)) - n(3p + 2(4u + 5v - w))
\end{aligned} \tag{2.48}$$

όπου $p + 2(u + v) = q > 0$, όπως έχει αποδειχθεί στο [4] και άρα $E[Wr(P_n)] = qn^2 + O(n)$. Χρησιμοποιώντας το Λήμμα 2.6.3 αποδεικνύεται ότι το $E[Wr(P_n)]$ είναι φραγμένο από κάτω από το $qn^2 - 6qn$.

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

$$E[Wr^2(P_n)] = E\left[\left(\frac{1}{4\pi} \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \sum_{1 \leq s \leq m_k} Wr_{\xi_s}(P_n) \delta S\right)^2\right] \tag{2.49}$$

Αφού $\lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \sum_{1 \leq s \leq m_k} Wr_{\xi_s}(P_n) \delta S < \infty$ και $\lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} Wr_{\xi_s}(P_n) \delta S\right)^2 < \infty$, έχουμε

$$E[Wr^2(P_n)] = \frac{1}{16\pi^2} E\left[\lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} Wr_{\xi_s}(P_n) \delta S\right)^2\right] \tag{2.50}$$

Παρατηρούμε ότι οι συναρτήσεις $S_k(P_n) = \left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} Wr_{\xi_s}(P_n) \delta S\right)^2$, $S_k : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μετρήσιμες, φραγμένες από πάνω από το $\left(\sum_{1 \leq s \leq m} Cr_{\xi_s}(P_n) \delta S\right)^2$, όπου $Cr_{\xi_s}(P_n)$ είναι το πλήθος των διασταυρώσεων σε μία προβολή του P_n στο επίπεδο με κάθετο διάνυσμα το ξ_s και $\left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} Cr_{\xi_s}(P_n) \delta S\right)^2 \leq (2 \cdot 4\pi n^2)^2$. Άρα, χρησιμοποιώντας το Θεώρημα Κυριαρχημένης Σύγκλισης του Lebesgue, έχουμε

$$\begin{aligned}
 E [W r^2 (P_n)] &= \frac{1}{16\pi^2} \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} E \left[\left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} W r_{\xi_s} (P_n) \delta S \right)^2 \right] \\
 &= \frac{1}{16\pi^2} \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} E \left[\left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} W r_{\xi_s}^2 (P_n) \delta S^2 + 2 \sum_{1 \leq s, t \leq m_k} W r_{\xi_s} (P_n) W r_{\xi_t} (P_n) \delta S^2 \right) \right] \quad (2.51) \\
 &= \frac{1}{16\pi^2} \cdot \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} E [W r_{\xi_s}^2 (P_n)] \delta S^2 + 2 \sum_{1 \leq s, t \leq m_k} E [W r_{\xi_s} (P_n)] E [W r_{\xi_t} (P_n)] \delta S^2 \right)
 \end{aligned}$$

Ο δεύτερος όρος στην (2.49) ισούται με μηδέν, αφού

$$E [W r_{\xi} (P_n)] = E \left[\sum_{1 \leq i \leq n} \sum_{\substack{j > i \\ j \neq i-1, i, i+1}} \epsilon_{ij} \right] = \sum_{1 \leq i \leq n} \sum_{\substack{j > i \\ j \neq i-1, i, i+1}} E [\epsilon_{ij}] = 0. \quad (2.52)$$

Αλλά αποδείξαμε ότι $E [W r_{\xi}^2 (P_n)] = qn^2 + O(n)$, και $E [W r_{\xi} (P_n)] = 0$, $\forall \xi \in S^2$. Επίσης, παρατηρούμε ότι για $\mu(\Delta_k)$ αρκετά μικρό, τότε $\delta S < 1$, άρα

$$\begin{aligned}
 E [W r^2 (P_n)] &= \frac{1}{16\pi^2} \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} (qn^2 + O(n)) \delta S^2 \right) \\
 &= \frac{1}{16\pi^2} (qn^2 + O(n)) \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} \delta S^2 \right) = O(n^2) \\
 \Rightarrow E [W r^2 (P_n)] &\leq \frac{1}{16\pi^2} (qn^2 + O(n)) \lim_{\mu(\Delta_k) \rightarrow 0} \left(\sum_{1 \leq s \leq m_k} \delta S \right)^2 \quad (2.53) \\
 &= \frac{1}{16\pi^2} (qn^2 + O(n)) \left(\int_{\xi \in S^2} dS \right)^2 \\
 &= qn^2 + O(n)
 \end{aligned}$$

□

2.6.2 Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης δύο ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων σε περιορισμένο χώρο

Η απόδειξη του Θεωρήματος 2.6.2 μπορεί εύκολα να προσαρμοστεί έτσι ώστε να μας δώσει την αυξητική τάση δύο ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων σε περιορισμένο χώρο. Για την ακρίβεια, έχουμε το παρακάτω θεώρημα που γενικεύει το αντίστοιχο Θεώρημα των Arsuaga et. al. ([4]).

Θεώρημα 2.6.4. *Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός περιέλιξης μεταξύ δύο προσανατολισμένων ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων X και Y με n ακμές, που περιέχονται στο C^3 , είναι της τάξεως $O(n^2)$. Παρόμοια αποτελέσματα ισχύουν εάν το C^3 αντικατασταθεί από ένα συμμετρικό κυρτό σύνολο στον \mathbb{R}^3 .*

Απόδειξη. Για μία συγκεκριμένη προβολή των περιπάτων σε ένα επίπεδο με κάθετο διάνυσμα $\vec{\xi} \in S^2$, προσαρμόζοντας το Θεώρημα 2.6.1 των Arsuaga et. al. ([4]) στην περίπτωση ανοικτών περιπάτων, έχουμε $E[lk_{\vec{\xi}}(X, Y)] = \frac{1}{2}n^2q + O(n)$ όπου $q > 0$. Τότε, ακολουθώντας την απόδειξη του Θεωρήματος 2.6.2, έχουμε ότι $E[Lk(X, Y)] = O(n^2)$. \square

2.6.3 Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός αυτο-περιέλιξης ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου

Το παρακάτω θεώρημα αφορά τον μέσο τετραγωνικό αριθμό αυτο-περιέλιξης ενός ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου.

Θεώρημα 2.6.5. *Ο μέσος τετραγωνικός αριθμός αυτο-περιέλιξης ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου με n ακμές, το οποίο περιέχεται στον C^3 είναι της τάξεως $O(n^2)$. Παρόμοια αποτελέσματα ισχύουν εάν το C^3 αντικατασταθεί από ένα συμμετρικό κυρτό σύνολο στον \mathbb{R}^3 .*

Απόδειξη. Θα χρησιμοποιήσουμε τον ορισμό του αριθμού αυτο-περιέλιξης που δόθηκε στο (3.2.3), δηλαδή $SL(l) = Wr(l) + \frac{1}{2\pi} \sum_i \phi_i$. Η απόδειξη βασίζεται στο γεγονός ότι οι γωνίες στρέψης $\phi_i \forall i \neq 1, n$ και τα γινόμενα $\epsilon_{ij}\phi_i \forall j \neq i+2, k \neq i+1$ είναι ανεξάρτητα στο μοντέλο URP.

Έστω P_n ένα ομοιόμορφο τυχαίο πολύγωνο στον C^3 . Προβάλλουμε το P_n σε ένα επίπεδο που ορίζεται από ένα κάθετο διάνυσμα $\xi \in S^2$. Για κάθε ζεύγος ακμών των ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων l_i και l_j ορίζουμε μία τυχαία μεταβλητή ϵ_{ij} όπως στην προηγούμενη παράγραφο. Τότε $E[\epsilon] = 0$ και $E[\epsilon^2] = 2p$. Για κάθε ακμή ορίζουμε μία τυχαία μεταβλητή ϕ_i τέτοια ώστε

ϕ_i ισούται με την προσημασμένη γωνία μεταξύ των \vec{B}_i και \vec{B}_{i+1} , τα κάθετα διανύσματα στα επίπεδα που ορίζονται από τις ακμές $i, i+1$ και $i+1, i+2$ αντίστοιχα. Τότε $\phi_i \in [-\pi, \pi], \forall i$. Αφού κάθε κορυφή του ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου επιλέγεται σύμφωνα με την ομοιόμορφη κατανομή, η ϕ_i είναι θετική ή αρνητική με την ίδια πιθανότητα, άρα $E(\phi_i) = 0, \forall i$. Τώρα έστω $E[\phi_i^2] = w$ και $E[|\phi_i|] = w'$. Για κάθε ζεύγος ακμών $\phi_i, \phi_j, i \neq 1, j \neq n$ έχουμε ότι $E[\phi_i \phi_j] = 0$, αφού ϕ_i, ϕ_j είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές σε αυτή την περίπτωση. Τώρα θα υπολογίσουμε τον μέσο τετραγωνικό αριθμό αυτο-περιέλιξης:

$$\begin{aligned}
 & E \left[\left(\sum_{\substack{1 \leq i < j \leq n \\ j \neq i-1, i, i+1}} \epsilon_{ij} + \sum_{1 \leq i \leq n} \phi_i \right)^2 \right] \\
 &= E \left[\left(\sum_{\substack{1 \leq i < j \leq n \\ j \neq i-1, i, i+1}} \epsilon_{ij} \right)^2 + \left(\sum_{1 \leq i \leq n} \phi_i \right)^2 + 2 \sum_{\substack{1 \leq i < j \leq n \\ j \neq i-1, i, i+1}} \sum_{1 \leq k \leq n} \epsilon_{ij} \phi_k \right] \\
 &= E \left[\left(\sum_{\substack{1 \leq i < j \leq n \\ j \neq i-1, i, i+1}} \epsilon_{ij} \right)^2 \right] + E \left[\left(\sum_{1 \leq i \leq n} \phi_i \right)^2 \right] \\
 &+ 2E \left[\sum_{\substack{1 \leq i < j \leq n \\ j \neq i-1, i, i+1}} \sum_{1 \leq k \leq n} \epsilon_{ij} \phi_k \right]
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Στην προηγούμενη παράγραφο αποδείξαμε ότι $E \left[\left(\sum_{\substack{1 \leq i < j \leq n \\ j \neq i-1, i, i+1}} \epsilon_{ij} \right)^2 \right] = O(n^2)$.

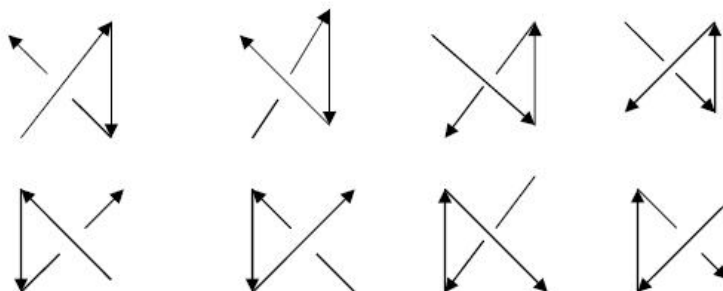
Για τον δεύτερο όρο έχουμε ότι

$$E \left[\left(\sum_{1 \leq i \leq n} \phi_i \right)^2 \right] = \sum_{1 \leq i \leq n} E[\phi_i^2] + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} E[\phi_i \phi_j] = wn + 2E[\phi_1 \phi_n] = O(n). \tag{2.55}$$

Για τον τρίτο όρο, σκεφτόμαστε ως εξής: Εάν $j \neq i-2, i+2$, τότε ϵ_{ij}, ϕ_k είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές για κάθε k , άρα $E[\epsilon_{ij} \phi_k] = 0$. Εάν $j = i+2$ τότε ϵ_{ij}, ϕ_k είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές για κάθε $k \neq i+1$. Φορ $k = i+1$, τότε υπάρχουν οκτώ διαφορετικές περιπτώσεις που μπορούν να συμβούν έτσι ώστε $E[\epsilon_{i+2} \phi_{i+1}] \neq 0$ (δείτε Εικόνα 2.8). Όλες τους δίνουν $+|\phi_{i+1}|$. Αφού οι κορυφές του πολυγώνου επιλέγονται σύμφωνα με την ομοιόμορφη

κατανομή, όλες οι περιπτώσεις έχουν την ίδια πιθανότητα, άρα $E[\epsilon_{i+2}\phi_{i+1}] = E[|\phi_{i+1}|] = w'$. Άρα, τελικά έχουμε

$$E[Sl^2(P_n)] = qn^2 + O(n). \quad (2.56)$$



Σχήμα 2.8: Για κάθε δυνατή διαμόρφωση των ακμών $i, i + 1$ και $i + 2$ τέτοιες ώστε $\epsilon_{i,i+2} \neq 0$, έχουμε $\epsilon_{i,i+2}\phi_{i+1} = |\phi_{i+1}|$

Στην περίπτωση ενός ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου R_n ο αριθμός αυτο-περιέλιξης δεν είναι τοπολογική αναλλοίωτη και κανείς πρέπει να ακολουθήσει μία αντίστοιχη διαδικασία εύρεσης μέσης τιμής όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 2.6.2. Τέλος, ο μέσος τετραγωνικός αριθμός αυτο-περιέλιξης ενός ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου R_n είναι $E[Sl^2(R_n)] = O(n^2)$. \square

2.6.4 Διαπλοκή μεταξύ μίας προσανατολισμένης καμπύλης και ενός προσανατολισμένου τυχαίου πολυγώνου σε περιορισμένο χώρο

Μία ακριβής απόδειξη της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς της πιθανότητας της διαπλοκής μεταξύ μίας προσανατολισμένης καμπύλης σταθερού μήκους και ενός προσανατολισμένου τυχαίου πολυγώνου που βρίσκονται περιορισμένα σε ένα κυρτό συμπαγές χώρο δίνεται στο [4].

Θεώρημα 2.6.6. 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 μη διαχωριζόμενο κρίκο τείνει στο 1 με ρυθμό τουλάχιστον $1 - O(\frac{1}{\sqrt{n}})$.

Ακολουθώντας την απόδειξη του Θεωρήματος 2.6.6, 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 2.6.7. 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

$$E(|L(R_n, S)|) \approx O(\sqrt{n}). \quad (2.57)$$

Παρατήρηση 2.6.8. 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 $Var(Y) = \sigma^2(1 - \frac{2}{\pi})$.

Για να αποδείξουμε το παραπάνω θεώρημα, θα χρειαστούμε το παρακάτω θεώρημα των πιθανοτήτων του C. Stein. Χρησιμοποιείται για να βρούμε ένα άνω όριο μεταξύ της κατανομής ενός αθροίσματος των όρων μίας m -εξαρτόμενης ακολουθίας τυχαίων μεταβλητών (δηλαδή οι X_1, X_2, \dots, X_s είναι ανεξάρτητες των X_t, X_{t+1}, \dots αν $t - s \geq m$) και μίας κανονική κατανομή.

Θεώρημα 2.6.9. Έστω x_1, x_2, \dots, x_n μία ακολουθία στάσιμων και m -εξαρτόμενων τυχαίων μεταβλητές έτσι ώστε $E[x_i] = 0, E[x_i^2] < \infty$ για κάθε i και

$$0 < C = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} E \left[\left(\sum_{1 \leq i \leq n} x_i \right)^2 \right] < \infty, \quad (2.58)$$

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

$$\left| P \left(\frac{1}{\sqrt{nC}} \sum_{1 \leq i \leq n} x_i \leq a \right) - \Phi(a) \right| \leq \frac{A}{\sqrt{n}} \quad (2.59)$$

για κάποια σταθερά $A > 0$

Απόδειξη του Θεωρήματος 2.6.7. 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 επιχειρήμα σαν ευτό που χρησιμοποιήσαμε στο Θεώρημα 2.6.2, έχουμε $p' + 2u' > 0$, όπου $p' = E(\epsilon_1^2)$ και $u' = E(\epsilon_1 \epsilon_2)$. Τότε για $n = 3$

$$\begin{aligned} V\left(\sum_{1 \leq i \leq 3} \epsilon_i\right) &= E\left[\left(\sum_{1 \leq i \leq 3} \epsilon_i\right)^2\right] = \sum_{1 \leq i \leq 3} E(\epsilon_i^2) + \sum_{1 \leq i, j \leq 3} E(\epsilon_i \epsilon_j) \\ &= 3p' + 3u' = 3(p' + u') > 0 \end{aligned} \quad (2.60)$$

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

$$0 < C = \frac{1}{n} E\left(\left(\sum_{1 \leq j \leq n} \epsilon_j\right)^2\right) = p' + 2u' \quad (2.61)$$

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 2.6.9, υπάρχει μία σταθερά $A > 0$ τέτοια ώστε

$$\begin{aligned} &|P\left(\frac{1}{\sqrt{(n-1)(p'+2u')}} \sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq \alpha\right) - \Phi(\alpha)| \leq \frac{A}{\sqrt{n-1}} \\ &\Rightarrow |P\left(\sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq \alpha \sqrt{(n-1)(p'+2u')}\right) - \Phi(\alpha)| \leq \frac{A}{\sqrt{n-1}} \\ &\Rightarrow |P\left(\sum_{1 \leq i \leq n-1} \epsilon_i \leq w\right) - \Phi\left(\frac{w}{\sqrt{(n-1)(p'+2u')}}\right)| \leq \frac{A}{\sqrt{n-1}} \end{aligned} \quad (2.62)$$

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 $E[|L(R_n, S)|] = O(\sqrt{n})$.

□

2.6.5 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 [68], 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 $-\frac{1}{2} \leq x \leq \frac{1}{2}, y = 0$.

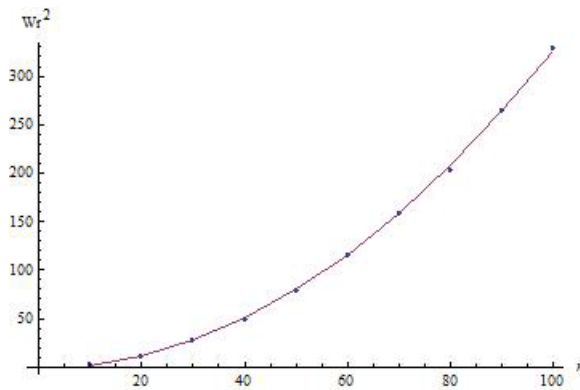
Εκτιμήσαμε τον αριθμό περιέλιξης μεταξύ ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων αναλύοντας ζεύγη από 10 υποσυλλογές από 500 ομοιόμορφα τυχαία πολύγωνα που κυμαίνονται από 10 ακμές σε 100 ακμές με ένα βήμα μεγέθους 10 ακμών, για τα οποία υπολογίσαμε την μέση τιμή και έπειτα υπολογίσαμε το μέσο των 10 μέσων τιμών 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 περιέλιξης 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 περιπάτους που κυμαίνονται από 10 έως 100 ακμές με ένα βήμα μεγέθους 10 ακμών, για τα οποία υπολογίσαμε την μέση τιμή της απόλυτης τιμής του αριθμού αυτοπεριέλιξης και μετά υπολογίσαμε το μέσο των 10 μέσων τιμών για την εκτίμησή μας για το $\langle ASL \rangle$.

2.6.5.1 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 2.6.2 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 2.9. 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



Σχήμα 2.9: Η μέση τετραγωνική συστρόφη ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων

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 2.6.2 υποστηρίζεται ισχυρά από τα δεδομένα.

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

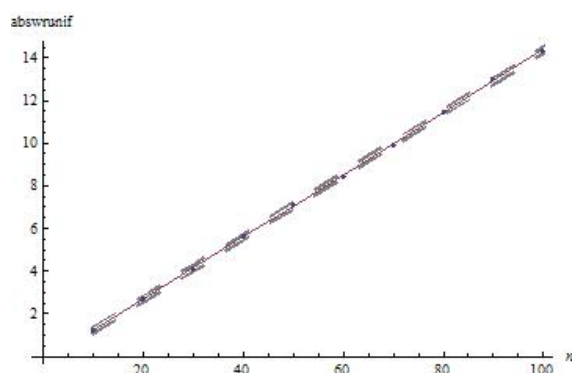
Τα αποτελέσματα φαίνονται στην Εικόνα 2.10. Η καμπύλη στην εικόνα έχει προσαρμοσθεί σε μία καμπύλη της μορφής $a + bn$ όπου το a εκτιμάται να είναι -0.2372 και το b εκτιμάται να είναι 0.146 , με συντελεστή προσδιορισμού $R^2 = 0.9998$.

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

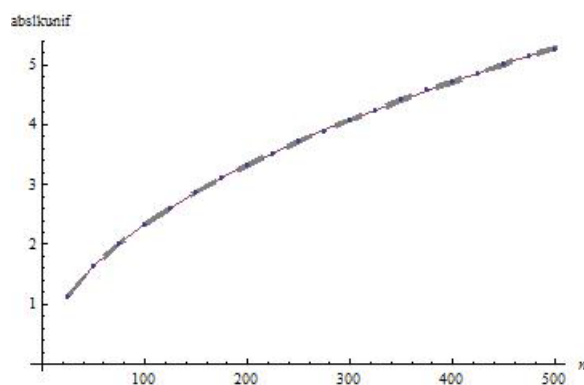
$$\sqrt{E[Wr^2]} \sim E[\sqrt{Wr^2}] = E[|Wr|]. \quad (2.63)$$

2.6.5.2 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 2.6.7, 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



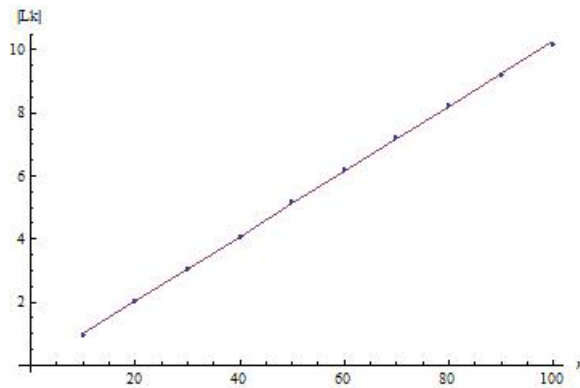
Σχήμα 2.10: Μέση απόλυτη τιμή της συστροφής ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων



Σχήμα 2.11: Μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ ενός ομοιόμορφου τυχαίου πολυγώνου και μίας επίπεδης κλειστής καμπύλης

αποτελέσματα των προσομοιώσεων φαίνονται στην Εικόνα 2.11. 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 2.6.7.

Έπειτα εξετάζουμε την διαπλοκή μεταξύ δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων. Από το Θεώρημα 2.6.1, 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 2.12. Η καμπύλη της εικόνας έχει προσαρμοστεί



Σχήμα 2.12: Η μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο ομοιόμορφων τυχαίων πολυγώνων

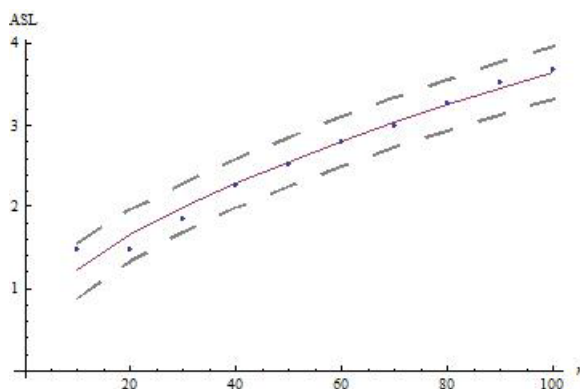
σε μία καμπύλη της μορφής $a + bn$ όπου το a εκτιμάται να είναι -0.03 και το b εκτιμάται να είναι 0.103 , με συντελεστή προσδιορισμού $R^2 = 0.9999$. Προφανώς, καθώς ο αριθμός των ακμών αυξάνει, παρατηρούμε μία αύξηση με ρυθμό $O(n)$. Αυτό υπονοεί ότι η αυξητική τάση της απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης 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

$$\sqrt{E[lk^2]} \sim E[\sqrt{lk^2}] = E[|lk|]. \quad (2.64)$$

2.6.5.3 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. Η Εικόνα 2.13 δείχνει τις τιμές του αριθμού αυτοπεριέλιξης $\langle |ASL| \rangle$ που λήφθηκαν από αριθμητικές προσομοιώσεις ιδανικών τυχαίων περιπάτων.

Προηγούμενα αριθμητικά αποτελέσματα [98] υποδηλώνουν ότι η μέση τιμή της απόλυτης συστροφής ενός ιδανικού τυχαίου περιπάτου αυξάνεται σαν \sqrt{n} , όπου n είναι το μήκος του



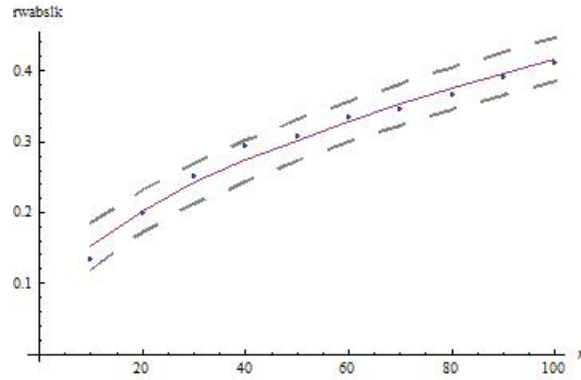
Σχήμα 2.13: Μέση απόλυτη τιμή της συστροφής ενός τυχαίου κανονικού περιπάτου.

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.

2.6.5.4 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 2.14 δείχνει ότι οι τιμές του μέσου απόλυτου αριθμού περιέλιξης $\langle ALN \rangle$ που πήραμε από τις αριθμητικές προσομοιώσεις κανονικών τυχαίων περιπάτων. Από το Θεώρημα ;; 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 2.14 αυτό επιβεβαιώνεται από τα αριθμητικά μας αποτελέσματα.

Από τα αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν στο [98], 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:



Σχήμα 2.14: Μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης δύο προσανατολισμένων κανονικών τυχαίων περιπάτων των οποίων τα αρχικά σημεία ταυτίζονται.

$$\langle AWR \rangle \approx O(\sqrt{n}). \quad (2.65)$$

Έστω $X = (X_0, X_1, \dots, X_n)$ και $Y = (Y_0, Y_1, \dots, Y_n)$ δύο προσανατολι-σμένοι κανονικοί τυχαίοι περίπατοι μήκους n , τα αρχικά σημεία των οποίων συμπίπτουν, δηλαδή $X_0 = Y_0 = 0$. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την αυ-ξητική 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

$$\begin{aligned} Wr(X - Y) &= Wr(X) + Wr(-Y) + L(X, -Y) \\ \Leftrightarrow Wr(X - Y) &= Wr(X) + Wr(-Y) - L(X, Y) \\ \Rightarrow L(X, Y) &= -Wr(X - Y) + Wr(X) + Wr(Y) \\ \Rightarrow |L(X, Y)| &\leq |Wr(X - Y)| + |Wr(X)| + |Wr(Y)| \\ \Rightarrow |L(X, Y)| &\leq O(\sqrt{2n}) + O(\sqrt{n}) + O(\sqrt{n}) \\ \Rightarrow |L(X, Y)| &\leq O(\sqrt{n}). \end{aligned} \quad (2.66)$$

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.

2.7 Συμπεράσματα

Η μέτρηση της διαπλοκής ανοικτών αλυσίδων έχει μεγάλο ενδιαφέρον σε πολλές εφαρμογές, όπως στην μελέτη των ιδιοτήτων των πολυμερικών τηγμάτων. Δείξαμε ότι το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss μπορεί να εφαρμοστεί σε ανοικτές αλυσίδες για να μετρήσει την διαπλοκή τους. Για ανοικτές αλυσίδες δείξαμε ότι είναι μία ομοιόμορφα συνεχής συνάρτηση των συντεταγμένων των κορυφών της αλυσίδας.

Στη συνέχεια, επικεντρωθήκαμε στην περίπτωση ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων (ανοικτών αλυσίδων) και πολυγώνων σε περιορισμένους χώρους. Στα Θεωρήματα 2.6.2, 2.6.1, 2.6.5 αποδείξαμε ότι η αυξητική τάση του μέσου τετραγωνικού αριθμού περιέλιξης, της μέσης τετραγωνικής συστροφής και του μέσου τετραγωνικού αριθμού αυτο-περιέλιξης ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων και πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο, σαν συνάρτηση του μήκους τους, είναι της μορφής $O(n^2)$.

Επιπλέον, μελετήσαμε στην μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης δύο ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων ή πολυγώνων σε περιορισμένο χώρο. Σε αυτή την κατεύθυνση, αποδείξαμε στο Θεώρημα 2.6.7 ότι η μέση απόλυτη τιμή του αριθμού περιέλιξης ενός προσανατολισμένου ομοιόμορφου τυχαίου περιπάτου ή πολυγώνου κα μίας απλής κλειστής καμπύλης σε περιορισμένο χώρο είναι της μορφής $O(\sqrt{n})$.

Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα εμβεβαίωσαν τις αναλυτικές μας προβλέψεις και επιπλέον έδειξαν ότι για δύο προσανατολισμένους ομοιόμορφους τυχαίους περιπάτους σε περιορισμένο χώρο είναι $\sqrt{E[lk^2]} \sim O(n) \sim E[\sqrt{l}k^2]$. Μία πιθανή μελλοντική εργασία είναι να αποδειχθεί αυτό το αριθμητικό αποτέλεσμα.

Τέλος μελετήσαμε αριθμητικά την διαπλοκή ιδανικών τυχαίων περιπάτων. Ιδανικοί τυχαίοι περίπατοι χρησιμοποιούνται για να προσομοιώσουν πολυμερή υπό θ -συνθήκες. Αναλύσαμε αριθμητικά την αυξητική τάση της μέσης απόλυτης τιμής του αριθμού περιέλιξης δύο ισοσκελών τυχαίων περιπάτων n βημάτων και της μέσης απόλυτης τιμής του αριθμού αυτο-περιέλιξης ενός ισοσκελούς τυχαίου περιπάτου n βημάτων. Και τα δύο δείχνουν μία αυξητική τάση της μορφής $O(\sqrt{n})$. Μία σημαντική κατεύθυνση για μελλοντική εργασία είναι να αποδειχθούν αυτά τα αριθμητικά αποτελέσματα.

Κεφάλαιο 3

Διαπλοκή σε συστήματα με Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες

Σε αυτό το κεφάλαιο, χρησιμοποιώντας τον αριθμό περιέλιξης κατά Gauss, ορίζουμε ένα νέο μέτρο διαπλοκής για αλυσίδες σε Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες (ΠΣΣ), τον *περιοδικό αριθμό περιέλιξης*, LKP . Μελετάμε τις ιδιότητές του για κλειστές και για ανοικτές αλυσίδες σε συστήματα με ΠΣΣ (Θεωρήματα 3.3.1, 3.3.7 και 3.3.16). Για την εφαρμογή στα πολυμερή ορίζουμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης, LK , και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού, LKC , ως προσεγγίσεις του περιοδικού αριθμού περιέλιξης. Τα αποτελέσματά μας σε δείγματα τηγμάτων Πολυαιθυλενίου (ΠΕ) επιβεβαιώνουν ότι ο αλγόριθμος CReTA, ο οποίος χρησιμοποιείται για να ληφθεί αδροποιημένη πληροφορία σχετικά με την διαπλοκή των πολυμερών, διατηρεί την τοπολογική πληροφορία ενός τήγματος.

Η προσομοίωση σε υπολογιστή ενός πολυμερικού τήγματος συνήθως κάνει χρήση μοριακής δυναμικής και μεθόδων Monte Carlo [104, 127]. Για την προσομοίωση του εσωτερικού ενός πολυμερικού τήγματος χρησιμοποιούνται ΠΣΣ ώστε να αποφευχθούν οι επιρροές του συνόρου στην δομή του τήγματος [128]. Σε ένα μοντέλο με ΠΣΣ, το κυβικό (συνήθως) κουτί προσομοίωσης επαναλαμβάνεται στον χώρο για να φτιάξει ένα άπειρο πλέγμα. Κατά την διάρκεια της προσομοίωσης, όταν ένα μόριο αφήνει το κεντρικό κουτί, η εικόνα του σε κάθε άλλο κουτί κινείται με ακριβώς τον ίδιο τρόπο. Άρα, καθώς ένα μόριο βγαίνει από το κεντρικό κουτί, μία εικόνα του μπαίνει από την απέναντι έδρα.

Η διαμόρφωση των μορίων μέσα στο κουτί προσομοίωσης παράγει την διαπλοκή στον συνεχή χώρο. Έτσι, η διαπλοκή του προσομοιωμένου τήγματος σε μεγάλη κλίμακα έχει ιδιαίτερα χαρακτηριστικά λόγω των ΠΣΣ που επιβάλλονται σε κάθε κελί. Για κάθε αλυσίδα του τήγματος μπορούμε να διακρίνουμε μεταξύ δύο τύπων τοπολογικών εμποδίων που επιβάλλονται από άλλες

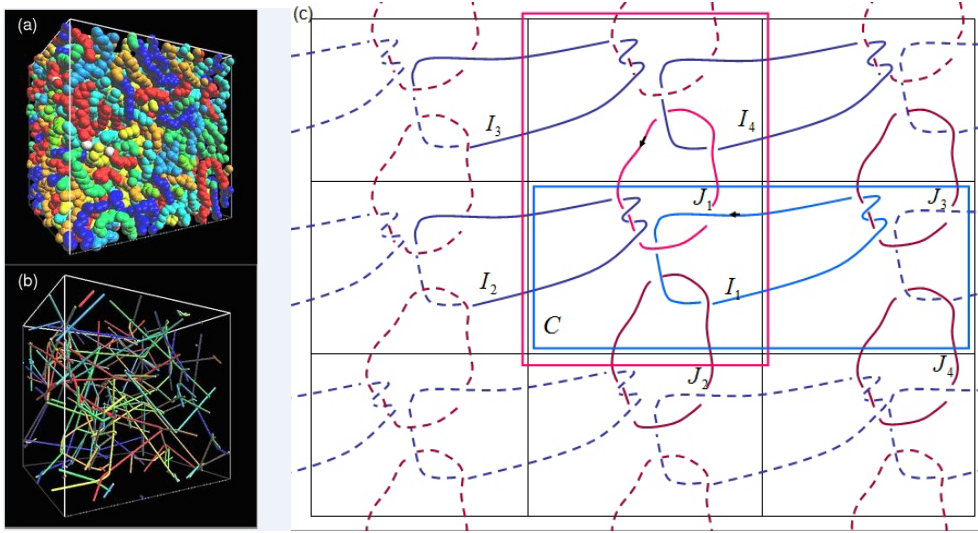
αλυσίδες: τοπικά τοπολογικά εμπόδια (δείτε Εικόνα 3.1), τα οποία μπορούν να εντοπιστούν στο εσωτερικό ενός κελιού προσομοίωσης, και τοπολογικά εμπόδια μεγάλης κλίμακας, που παρατηρούνται μόνο σε μία μεγαλύτερη κλίμακα.

Ένας από τους λόγους για τους οποίους οι κόμβοι και οι κρίκοι στα πολυμερή δεν έχουν μελετηθεί εκτενώς σε πυκνά πολυμερικά τήγματα είναι το πρόβλημα της διαχείρισης των ΠΣΣ. Ο στόχος αυτού του κεφαλαίου είναι να περιγραφούν μέθοδοι με τις οποίες μπορούμε να μετρήσουμε την διαπλοκή σε ένα σύστημα με ΠΣΣ. Πιο συγκεκριμένα, στην Παράγραφο 3.1 περιγράφουμε την δομή ενός συστήματος αλυσίδων σε ΠΣΣ. Στην Παράγραφο 3.2 εισάγουμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης και μελετάμε τις ιδιότητές του για κλειστές και ανοικτές αλυσίδες σε συστήματα με ΠΣΣ. Για την εφαρμογή στα πολυμερή, στις Παραγράφους 3.4 και 3.5, ορίσουμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού, και μελετάμε τις ιδιότητές τους. Στην Παράγραφο 3.6 εφαρμόζουμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης σε τήγματα πολυαιθυλενίου (ΠΕ) και μελετάμε την επιρροή του αλγορίθμου CReTA στην διαπλοκή του συστήματος. Επίσης, εφαρμόζουμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού και εξετάζουμε την σχέση του με τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης.

3.1 Συστήματα με ΠΣΣ

Μελετάμε ένα τήγμα πολυμερούς που αποτελείται από μία συλλογή πολυμερικών αλυσίδων μήκους N , διαιρώντας τον χώρο σε μία οικογένεια κυβικών κουτιών όγκου L^3 , όπου L είναι το μήκος μίας ακμής του κύβου, έτσι ώστε η δομή του τήγματος σε κάθε κύβο είναι η ίδια, δηλαδή επιβάλλουμε ΠΣΣ στο τήγμα [115]. Πιο συγκεκριμένα, δίνουμε τον παρακάτω ορισμό:

Ορισμός 3.1.1. Ένα κελί είναι ένας κύβος με n τόξα εμφυτευμένα μέσα του έτσι ώστε τα άκρα τους βρίσκονται είτε στο εσωτερικό του κελιού ή σε μία έδρα του, αλλά όχι σε μία ακμή ή μία γωνία, και αυτά τα οποία συναντούν μία έδρα υπόκεινται σε ΠΣΣ. Δηλαδή σε κάθε τελικό σημείο πάνω σε μία έδρα αντιστοιχεί ένα αρχικό σημείο στην απέναντι έδρα στην ακριβώς απέναντι θέση. Δείτε Εικόνα 3.1(β).



Σχήμα 3.1: (a) Αντοπροσωπευτικό δείγμα ΠΕ και (b) το αντίστοιχο αδροποιημένο δίκτυο. (c) Το κεντρικό κελί C και το περιοδικό σύστημα που παράγει. Η γεννήτορας αλυσίδα i (αντίστοιχα j) αποτελείται από τα μπλέ (αντίστοιχα κόκκινα) τόξα στο C . Η ελεύθερη αλυσίδα I (αντίστοιχα J) είναι το σύνολο των μπλέ (αντίστοιχα κόκκινων) αλυσίδων στο περιοδικό σύστημα. Με έντονο χρώμα είναι τα ελαχιστικά αναπτύγματα των εικόνων I_1 και J_1 . Για τον υπολογισμό του $LK(J, I)$ έχουμε $LK(J, I) = L(J_1, I_1) + L(J_1, I_2) + L(J_1, I_3) + L(J_1, I_4)$. Μπορούμε να δούμε ότι $L(I_1, J_1) = L(J_1, I_1)$, $L(I_1, J_2) = L(J_1, I_4)$, $L(I_1, J_3) = L(J_1, I_2)$ και $L(I_1, J_4) = L(J_1, I_3)$, άρα $LK(I, J) = LK(J, I)$.

Ένα κελί παράγει ένα περιοδικό σύστημα στον 3-διάστατο χώρο ταυτίζοντας τις έδρες των κύβων έτσι ώστε να γεμίζουν τον χώρο και να τέμνονται μόνο στις έδρες τους. Αυτό επιτρέπει σε ένα τόξο στο κελί να συνεχίζεται μέσα από μία έδρα στον διπλανό κύβο κλπ. Αφού οι πολυμερικές αλυσίδες έχουν πεπερασμένο μήκος, επιβάλλεται οι αλυσίδες που παράγονται να είναι συμπαγείς.

Για πρακτικούς λόγους, μόνο ένα πεπερασμένο πλήθος αντιγράφων των κελιών χρησιμοποιούνται. Θα ονομάζουμε μία τέτοια συλλογή ένα πεπερασμένο περιοδικό σύστημα.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, επιλέγουμε ένα κελί στο περιοδικό σύστημα το οποίο ονομάζουμε κελί γεννήτορα. Τότε κάθε άλλο κελί c στο περιοδικό σύστημα είναι μία μεταφορά του κελιού γεννήτορα κατά ένα διάνυσμα $\vec{c} = (c_x, c_y, c_z)$, $c_x, c_y, c_z \in L\mathbb{Z}$. Μία γεννήτορας αλυσίδα είναι η ένωση όλων των τμημάτων μέσα στο κελί των οποίων οι μεταφορές ορίζουν ένα μέγιστο συνεκτικό τόξο μέσα στο σύστημα. Για κάθε τόξο μίας γεννητόρου αλυσίδας επιλέγουμε έναν

προσανατολισμό έτσι ώστε οι μεταφορές όλων των τόξων να ορίζουν ένα προσανατολισμένο τόξο στο περιοδικό σύστημα. Για κάθε γεννήτορα αλυσίδα επιλέγουμε ένα τόξο και ένα σημείο πάνω σε αυτό να είναι το *σημείο βάσης* του μέσα στο κελί. Ένα *ξεδίπλωμα* μίας γεννητόρου αλυσίδας είναι ένα συνεκτικό τόξο στο περιοδικό σύστημα που αποτελείται από ακριβώς μία μεταφορά κάθε τόξου της γεννητόρου αλυσίδας. Η μικρότερη ένωση αντιγράφων του κελιού που χρειάζονται για ένα ξεδίπλωμα μίας γεννητόρου αλυσίδας ονομάζεται *ελαχιστικό ξεδίπλωμα*. Η μικρότερη ένωση κελιών που περιέχουν το κυρτό κάλυμμα του ξεδιπλώματος μίας γεννητόρου αλυσίδας λέγεται *ελαχιστικό τοπολογικό κελί*.

Για γεννήτορες αλυσίδες χρησιμοποιούμε τα σύμβολα i, j, \dots . Μία γεννήτορας αλυσίδα λέγεται *κλειστή* (αντίστοιχα *ανοικτή*) όταν το ξεδίπλωμά της είναι μία κλειστή (αντίστοιχα *ανοικτή*) αλυσίδα. Η συλλογή όλων των μεταφορών της ίδιας γεννητόρου αλυσίδας i ονομάζεται *ελεύθερη αλυσίδα*, συμβολίζουμε I . Μία ελεύθερη αλυσίδα ταυτίζεται με την συλλογή των συνεκτικών της συνιστωσών, κάθε μία από τις οποίες είναι μία μεταφορά ενός ξεδιπλώματος μίας γεννητόρου αλυσίδας στο περιοδικό σύστημα. Για ελεύθερες αλυσίδες θα χρησιμοποιούμε τα σύμβολα I, J, \dots . Μία *εικόνα* μίας ελεύθερης αλυσίδας σε αυτή τη συλλογή είναι το ξεδίπλωμα μίας γεννήτορα αλυσίδας. Για τις εικόνες μίας ελεύθερης αλυσίδας, έστω I , θα χρησιμοποιούμε τα σύμβολα I_1, I_2, \dots . Ονομάζουμε *πρωτότυπη εικόνα* την εικόνα της I το σημείο βάσης της οποίας κείται στο κελί γεννήτορα. Τότε κάθε άλλη εικόνα της I μπορεί να οριστεί από ένα διάνυσμα σε σχέση με το σημείο βάσης της πρωτότυπης εικόνας. Δηλαδή, για κάθε εικόνα I_k της I , υπάρχει ένα διάνυσμα $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$, $v_x, v_y, v_z \in \mathbb{LZ}$ τέτοιο ώστε η I_k είναι μία μεταφορά της I_1 κατά \vec{v} , όπου το σημείο βάσης του \vec{v} είναι το σημείο βάσης της I_1 . Συμβολίζουμε:

$$I_k = I_1 + \vec{v} \quad (3.1)$$

3.2 Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης, LK_P

Στην περίπτωση ενός περιοδικού συστήματος χρειάζεται ένα διαφορετικό μέτρο διαπλοκής από τα κλασικά ώστε να λάβουμε υπόψην όλα τα τοπολογικά εμπόδια και το αποτέλεσμα της περιοδικότητας των διαμορφώσεων [108, 94]. Εδώ, εφαρμόζουμε το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss σε αλυσίδες σε ΠΣΣ παρέχοντας ένα μέτρο της διαπλοκής των αλυσίδων σε μεγάλη κλίμακα. Προτείνουμε τον παρακάτω ορισμό του αριθμού περιέλιξης μεταξύ δύο ελεύθερων αλυσίδων σε ένα σύστημα με ΠΣΣ:

Ορισμός 3.2.1 (Περιοδικός αριθμός περιέλιξης). Έστω I και J δύο ελεύθερες αλυσίδες σε ένα περιοδικό σύστημα. Έστω I_1 μία εικόνα της ελεύθερης αλυσίδας I στο περιοδικό σύστημα. Ο *περιοδικός αριθμός περιέλιξης*, LK_P , μεταξύ δύο ελεύθερων αλυσίδων I και J ορίζεται ως:

$$LK_P(I, J) = \sum_u L(I_1, J_u) \quad (3.2)$$

όπου το άθροισμα είναι πάνω από όλες τις εικόνες J_u της ελεύθερης αλυσίδας J στο περιοδικό σύστημα.

Θεωρούμε το κελί γεννήτορας να είναι το κελί στο οποίο κείται το σημείο βάσης της I_1 . Έστω J_1 η πρωτότυπη εικόνα της J ως προς αυτό το κελί γεννήτορας. Τότε ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης μπορεί να εκφραστεί ως:

$$LK_P(I, J) = \sum_u L(I_1, J_1 + \vec{v}_u) \quad (3.3)$$

όπου $\vec{v}_u = (v_{u_1}, v_{u_2}, v_{u_3}), v_{u_i} \in \mathbb{L}\mathbb{Z}$.

Ιδιότητες του περιοδικού αριθμού περιέλιξης

Πρόταση 3.2.2. *Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης, LK_P , μεταξύ δύο ελεύθερων αλυσίδων I και J ενός συστήματος με ΠΣΣ είναι συμμετρικός.*

Απόδειξη. Για κάθε ζεύγος εικόνων $I_1, J_1 + \vec{v}_u$ στην εξ. 3.9, τότε κάθε ζεύγος εικόνων $I_1 - \vec{v}_u, J_1$ βρίσκονται στην ίδια σχετική θέση. Άρα έχουμε $L(I_1, J_1 + \vec{v}_u) = L(I_1 - \vec{v}_u, J_1)$. Άρα είναι:

$$\begin{aligned} LK_P(I, J) &= \sum_u L(I_1, J_1 + \vec{v}_u) = \sum_u L(I_1 - \vec{v}_u, J_1) \\ &= \sum_u L(J_1, I_1 - \vec{v}_u) = \sum_{u'} L(J_1, I_1 + \vec{v}'_u) = LK_P(J, I) \end{aligned} \quad (3.4)$$

□

Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης έχει τις παρακάτω ιδιότητες σε σχέση με την δομή του κελιού:

- (i) ο LK_P λαμβάνει υπόψην όλα τα τοπικά και γενικά τοπολογικά εμπόδια που επιβάλλουν όλες οι εικόνες μίας ελεύθερης αλυσίδας στο περιοδικό σύστημα σε μία εικόνα της άλλης,
- (ii) ο LK_P είναι ανεξάρτητος από την επιλογή του κελιού στο περιοδικό σύστημα και της εικόνας της I που χρησιμοποιούμε για τον υπολογισμό,
- (iii) ο LK_P είναι ανεξάρτητος από την θέση και το σχήμα του κελιού που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση ενός συστήματος.

Ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης

Παρατηρούμε ότι σε συστήματα με ΠΣΣ μία αλυσίδα μπορεί να είναι πεπλεγμένη με τις δικές της περιοδικές εικόνες. Άρα ένα μέτρο της αυτο-διαπλοκής σε συστήματα με ΠΣΣ πρέπει να λαμβάνει υπόψη αυτή την διαπλοκή. Γι' αυτό θα ορίσουμε ένα μέτρο αυτο-διαπλοκής στο επίπεδο των ελεύθερων αλυσίδων:

Ορισμός 3.2.3 (Περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης). Έστω I μία ελεύθερη αλυσίδα στο περιοδικό σύστημα και έστω I_1 μία εικόνα της I , τότε ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης της I ορίζεται ως:

$$SL_P(I) = Sl(I_1) + \sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u) \quad (3.5)$$

όπου ο δείκτης u τρέχει πάνω από όλες τις εικόνες της I , εκτός της I_1 .

Η περιοδική συστροφή και ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης αυτο-εικόνων

Παρατηρούμε ότι ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης της I μπορεί να γραφτεί ως

$$SL_P(I) = Wr(I_1) + \tau(I_1) + \sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u) \quad (3.6)$$

Παρατηρούμε ότι η ποσότητα $\sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u)$ λαμβάνει ακριβώς τη συνολική διαπλοκή μίας εικόνας με τις μεταφορές της στο περιοδικό σύστημα. Στις εφαρμογές θα μας ενδιαφέρει αυτή η ποσότητα έτσι ορίζουμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων ως:

$$LKS_P(I) = \sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u) \quad (3.7)$$

Επίσης παρατηρούμε ότι η ποσότητα $Wr(I_1) + \tau(I_1) + \sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u)$ ισούται με τον μέσο αλγεβρικό αριθμό αυτο-τομών μίας ελεύθερης αλυσίδας I , που εξορισμού αποτελεί μία επέκταση της συστροφής σε ΠΣΣ. Έτσι, ορίζουμε την περιοδική συστροφή μίας ελεύθερης αλυσίδας I ως:

$$WR_P(I) = Wr(I_1) + \sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u) \quad (3.8)$$

3.2.1 Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης κλειστών αλυσίδων

Υπενθυμίζουμε ότι για κάθε κλειστή καμπύλη υπάρχει μία επιφάνεια της οποίας είναι σύνορο. Άρα υπάρχει μία επιφάνεια $S(I_1)$, τέτοια ώστε $\partial S(I_1) = I_1$. Τότε για κάθε εικόνα της J , έστω J_k , που δεν τέμνει την $S(I_1)$, έχουμε $L(I_1, J_k) = 0$. Άρα ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης κλειστών καμπύλων μπορεί να εκφραστεί ως

$$LK_P(I, J) = \sum_{u \in S} L(I_1, J_1 + \vec{v}_u) \quad (3.9)$$

όπου $J_1 + \vec{v}_u$, $u \in S$ είναι όλες οι μεταφορές της J_1 που τέμνουν την επιφάνεια Seifert με σύνορο την I_1 . Άρα ο LK_P κλειστών αλυσίδων είναι ένα πεπερασμένο άθροισμα.

Έπεται ότι ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη για κλειστές αλυσίδες. Είναι ένας ακέραιος αριθμός και ισούται με τον μισό αλγεβρικό αριθμό των διασταυρώσεων μεταξύ της προβολής μίας εικόνας της I και των προβολών όλων των εικόνων της J σε οποιοδήποτε επίπεδο προβολής. Όταν οι αλυσίδες δεν αγγίζουν το κελί, τότε ισούται με τον αριθμό περιέλιξης των πρωτότυπων εικόνων.

3.2.1.1 Σύνδεση του LK_P με τον αριθμό περιέλιξης Gauss

Σε αυτή την παράγραφο θα δείξουμε ότι ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης δύο κλειστών ελεύθερων αλυσίδων ταυτίζεται με τον αριθμό περιέλιξης δύο κλειστών αλυσίδων που κείτονται σε μία πολλαπλότητα διαφορετική από τον \mathbb{R}^3 .

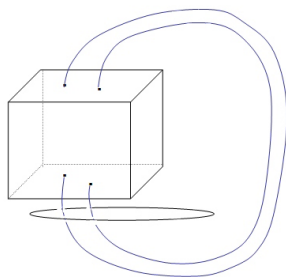
Παρατηρούμε ότι ένα κελί με μία, δύο ή τρεις ΠΣΣ ορίζει έναν χώρο ταύτισης που δημιουργείται ταυτίζοντας τις απέναντι έδρες ενός κελιού σύμφωνα με τις ΠΣΣ. Αυτός ο χώρος είναι ο τόρος με περιεχόμενο, $ST = S^1 \times D$, ο πεπαχυμένος τόρος $T^2 \times I = S^1 \times S^1 \times I$, ή ο τρία τόρος $T^3 = S^1 \times S^1 \times S^1$ στην περίπτωση μίας, δύο ή τριών ΠΣΣ αντίστοιχα (δείτε Παράγραφο 1.5.1).

Ορισμός 3.2.4. Με την ταύτιση του κελιού σύμφωνα με τις ΠΣΣ όλα τα τόξα μίας γεννητόρου αλυσίδας, έστω i , συνδέονται για να δημιουργήσουν μία κλειστή ή ανοικτή αλυσίδα στον T^3 (ή τον ST , ή τον $T^2 \times I$ στην περίπτωση μίας, ή δύο ΠΣΣ αντίστοιχα), την οποία ονομάζουμε *αλυσίδα ταύτισης*, και θα συμβολίζεται \bar{I} .

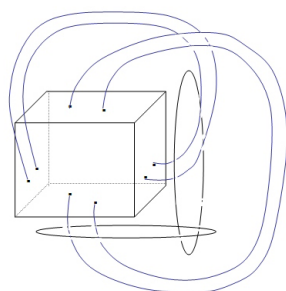
Για να δούμε τις αλυσίδες ταύτισης σαν αλυσίδες στον 3-διάστατο χώρο, μπορούμε να αναπαραστήσουμε τις αλυσίδες στον T^3 (ή τον ST , ή τον $T^2 \times I$ στην περίπτωση μίας, ή δύο ΠΣΣ αντίστοιχα) με μικτούς κρίκους στον \mathbb{R}^3 χρησιμοποιώντας βοηθητικές απλές κλειστές καμπύλες που αντιστοιχούν στις ταυτίσεις, όπως στα [78, 94] (δείτε Παράγραφο 1.7).

Ορισμός 3.2.5. Έστω ένα κελί και μία γεννήτορας αλυσίδα i μέσα στο κελί. Ονομάζουμε *πραγματοποιημένη αλυσίδα*, \bar{i} , την καμπύλη στον τριδιάστατο χώρο \mathbb{R}^3 που φτιάχνεται από την αλυσίδα ταύτισης \bar{I} στον T^3 , αγνοώντας τις βοηθητικές καμπύλες.

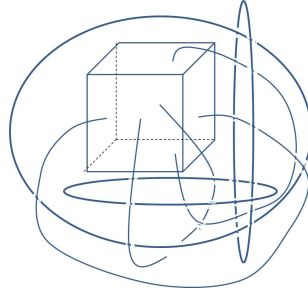
Η πραγματοποιημένη αλυσίδα, \bar{i} , φτιάχνεται από την i ενώνοντας με απλά τόξα που πάνε γύρω από το κελί τα τελικά σημεία της γεννητόρου αλυσίδας σύμφωνα με τις ΠΣΣ. Αυτά τα τόξα θα λέγονται *τόξα κλεισίματος*. Κάθε τόξο κλεισίματος ενώνει απέναντι σημεία και θα λέγεται x - y - ή z - τόξο κλεισίματος αντίστοιχα. Μία βοηθητική καμπύλη αντιστοιχεί σε κάθε ζεύγος των x - y - ή z -εδρών που ταυτίζονται αντίστοιχα, δείτε Εικόνες 3.2,3.3,3.4.



Σχήμα 3.2: Στην περίπτωση 1 ΠΣΣ, υπάρχει μόνο μία βοηθητική καμπύλη που αναπαριστά το συμπλήρωμα του τόρου με περιεχόμενο.



Σχήμα 3.3: Στην περίπτωση 2 ΠΣΣ, υπάρχουν δύο βοηθητικές καμπύλες που αναπαριστούν το συμπλήρωμα του πεπαχυμένου τόρου, δηλαδή τον κρίκο hopf .



Σχήμα 3.4: Στην περίπτωση 3 ΠΣΣ, υπάρχουν τρεις βοηθητικές καμπύλες που αναπαριστούν τον κρίκο borromean. Χειρουργική κατά μήκος του κρίκου borromean μας δίνει τον T^3 , δείτε Παράγραφο 1.6.

Το περιοδικό σύστημα δημιουργείται κολλώντας άπειρα αντίτυπα του κελί γεννήτορα σύμφωνα με τις ΠΣΣ. Άρα, το περιοδικό σύστημα είναι το καθολικό κάλυμμα του χώρου ταύτισης, δείτε Παράγραφο 1.5.2. Βασισμένοι σε αυτή την παρατήρηση μπορούμε να συσχετίσουμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης των ελεύθερων αλυσίδων στο περιοδικό σύστημα με τον αριθμό τομών των ταυτοτικών αλυσίδων, και τον αριθμό περιέλιξης των αντίστοιχων πραγματοποιήσιμων αλυσίδων. Πιο συγκεκριμένα, θα δείξουμε ότι

Πρόταση 3.2.6. Έστω I, J δύο ελεύθερες αλυσίδες σε ένα σύστημα με ΠΣΣ, τότε

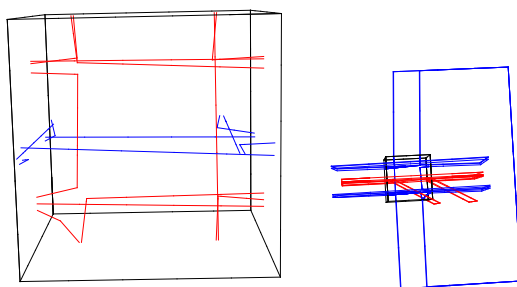
$$LK_P(I, J) = \text{int}(\bar{I}, \bar{J}) = L(\bar{i}, \bar{j}) \quad (3.10)$$

Απόδειξη. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε ένα σύστημα με τρεις ΠΣΣ. Πρώτα παρατηρούμε ότι, αφού οι αλυσίδες στον \mathbb{R}^3 είναι συμπαγείς, αναπαριστούν ομολογικά τετριμένα στοιχεία στον $H_2(\mathbb{R}^3)$. Αφού ο \mathbb{R}^3 είναι το ολικό κάλυμμα του T^3 , υπάρχει μία απεικόνιση $p: \mathbb{R}^3 \rightarrow T^3$ που είναι τοπικός ομοιομορφισμός. Τότε από την Πρόταση 1.3.2, γνωρίζουμε ότι υπάρχει ένας επαγόμενος ομομορφισμός $p^*: H_2(\mathbb{R}^3) \rightarrow H_2(T^3)$. Άρα, ομολογικά τετριμένα στοιχεία του \mathbb{R}^3 απεικονίζονται σε ομολογικά τετριμένα στοιχεία του T^3 . Έστω $\sigma \in T^3$ ένα 2-κύκλημα τέτοιο ώστε $\partial\sigma = \bar{I} \in T^3$. Τότε $\text{int}(\bar{J}, \sigma) = \text{int}(\bar{j}, \sigma)$ το οποίο ισούται με $L(\bar{i}, \bar{j})$ όπως εξηγείται στην Παρατήρηση 1.4.1 στην Παράγραφο 1.4.1.

Έστω $\Sigma \in \mathbb{R}^3$ μία 2-αλυσίδα τέτοιο ώστε $\partial\Sigma = I_1$. Θα αποδείξουμε ότι ο αριθμός τομών μεταξύ των $\bar{J} \in T^3$ και $\sigma \in T^3$ ισούται με το άθροισμα των τομών όλων των εικόνων της J στο περιοδικό σύστημα με την Σ . Από την Πρόταση 1.3.2 γνωρίζουμε ότι $\Sigma \in p^{-1}(\sigma)$. Έστω x_1, \dots, x_m τα σημεία τομών της \bar{J} με την σ . Τότε η $p^{-1}(x_i)$ είναι ένα σύνολο σημείων στον \mathbb{R}^3 , καθένα από τα οποία κείται σε μία μοναδική συνιστώσα του $p^{-1}(\sigma)$. Άρα η Σ περιέχει ακριβώς ένα σημείο της $p^{-1}(x_i)$ για κάθε $x_i, i = 1, \dots, m$. Επίσης, από το Λήμμα 1.5.5, υπάρχει μία

μοναδική εικόνα της J που τέμνει κάθε σημείο στην $p^{-1}(x_i)$. Άρα καθένα από τα σημεία της $p^{-1}(x_i)$ για κάθε $x_i, i = 1, \dots, m$ είναι ένα σημείο τομής μεταξύ της Σ και μίας εικόνας της J . Από την άλλη, εάν υπήρχε άλλο ένα επιπλέον σημείο τομής, έστω x' , από την Πρόταση 1.3.2 και το Λήμμα 1.5.5, γνωρίζουμε ότι θα ανήκε στην σ και στην \bar{j} . Άρα το άθροισμα των τομών σε μία επιφάνεια με σύνορο μία εικόνα της I στον \mathbb{R}^3 με όλες τις εικόνες της J ισούται με το άθροισμα των τομών σε μία επιφάνεια με σύνορο την $\bar{i} \in T^3$ με την \bar{j} . Τέλος, από την Παρατήρηση 1.4.1 στην Παράγραφο 1.4.1 το άθροισμα των αριθμών τομών μίας επιφάνειας Σ με τις εικόνες της J ισούται με το άθροισμα των αριθμών περιέλιξης μεταξύ της I_1 και τις εικόνες της J , δηλαδή ισούται με $LK_P(I, J)$. \square

Παρατήρηση 3.2.7. Αυτό το αποτέλεσμα μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης δύο ελεύθερων αλυσίδων με τον αριθμό περιέλιξης δύο πραγματοποιήσιμων αλυσίδων στον \mathbb{R}^3 . Αυτός ο υπολογισμός θα ελάττωνε το υπολογιστικό κόστος του περιοδικού αριθμού περιέλιξης (Εικόνα 3.5).



Σχήμα 3.5: (α) Ένα κελί με δύο γεννήτορες αλυσίδες, i, j , με $LK_P(I, J) = 0$. (β) Οι αντίστοιχες πραγματοποιήσιμες αλυσίδες, \bar{i}, \bar{j} με $L(\bar{i}, \bar{j}) = 0$.

Η παρακάτω πρόταση δείχνει ότι στην περίπτωση μίας και δύο ΠΣΣ, είναι δυνατόν να υπολογίσουμε το LK_P μόνο από τις γεννήτορες αλυσίδες. Στη συνέχεια ονομάζουμε το ζεύγος των δεξιών-αριστερών εδρών x -έδρες και τα τόξα κλεισίματος που ενώνουν σημεία πάνω σε αυτές τις έδρες x -τόξα κλεισίματος. Ομοίως ορίζουμε τις y -έδρες και τα y -τόξα κλεισίματος, και τις z -έδρες και τα z -τόξα κλεισίματος.

Πρόταση 3.2.8. Έστω ένα κελί με μία ή δύο ΠΣΣ που επιβάλλονται στις x - ή/και τις y -έδρες του κελιού. Τότε ισχύει το παρακάτω:

$$LK_P(I, J) = \left(L(i, j) \right)_{xy}, \quad (3.11)$$

όπου $(L(i, j))_{xy}$ ισούται με το μισό αλγεβρικό άθροισμα των διασταυρώσεων μεταξύ των i και j όταν προβάλλονται στο xy -επίπεδο.

Απόδειξη. Θα επικεντρωθούμε στην περίπτωση των δύο ΠΣΣ, αφού το οαποτελέσμα για μία ΠΣΣ έπεται εύκολα από αυτήν την περίπτωση. Έστω ότι προβάλλουμε το περιοδικό σύστημα στο xy -επίπεδο. Στην συνέχεια για δύο τόξα f, g έστω $cr(f, g)$ οι διασταυρώσεις μεταξύ των προβολών των f και g στο xy -επίπεδο. Παρατηρούμε ότι το σημείο βάσης της I_0 είναι επίσης το σημείο βάσης της γεννητόρου αλυσίδας στο κελί γεννήτορα. Τότε μπορούμε να ορίσουμε μία μεταφορά της γεννητόρου αλυσίδας σε κάθε άλλο κελί στο περιοδικό σύστημα με ένα διάνυσμα με βάση αυτό το σημείο. Έστω i_1, \dots, i_k τα τόξα που αποτελούν την γεννήτορα αλυσίδα i , και έστω j_1, \dots, j_l τα τόξα που αποτελούν την γεννήτορα αλυσίδα j . Μπορούμε επίσης να ορίσουμε ένα σημείο βάσης για κάθε τόξο της γεννητόρου αλυσίδας. Έστω τότε $i_1 + \vec{u}_1, \dots, i_k + \vec{u}_k$ οι μεταφορές των τόξων της γεννητόρου αλυσίδας i που αποτελούν την εικόνα I_0 και έστω $j_1 + \vec{v}_1, \dots, j_l + \vec{v}_l$ οι μεταφορές των τόξων της γεννητόρου αλυσίδας j που αποτελούν την εικόνα J_0 (Εξ ορισμού, υπάρχει ακριβώς μία μεταφορά ενός τόξου της i (αντίστ. j) στην I_0 (αντίστ. J_0). Τότε

$$\begin{aligned}
LK_P(I, J) &= \frac{1}{2} \sum_v L(I_0, J_0 + \vec{v}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_v \sum_{c \in cr(I_0, J_0 + \vec{v})} sign(c) = \sum_v \sum_{1 \leq m \leq l} \sum_{c \in cr(I_0, j_m + \vec{v})} sign(c) \\
&= \sum_{j + \vec{v} \in mu(I_0)} \sum_{1 \leq m \leq l} \sum_{c \in cr(I_0, j_m + \vec{v})} sign(c) \\
&+ \sum_{j + \vec{v} \notin mu(I_0)} \sum_{1 \leq m \leq l} \sum_{c \in cr(I_0, j_m + \vec{v})} sign(c),
\end{aligned} \tag{3.12}$$

όπου $mu(I_0)$ είναι το ελαχιστικό ανάπτυγμα της I_0 . Όμως παρατηρούμε ότι στην συγκεκριμένη κατεύθυνση προβολής, είναι αδύνατο να έχουμε διασταυρώσεις μεταξύ των I_0 και των μεταφορών των τόξων της j που δεν κείτονται μέσα στο $mu(I_0)$, άρα:

$$\begin{aligned}
LK_P(I, J) &= \sum_{j + \vec{v} \in mu(I_0)} \sum_{1 \leq m \leq l} \sum_{c \in cr(I_0, j_m + \vec{v})} sign(c) \\
&= \sum_{j + \vec{v} \in mu(I_0)} \sum_{1 \leq m \leq l} \sum_{1 \leq n \leq k} \sum_{c \in cr(i_n + \vec{u}_n, j_m + \vec{v})} sign(c).
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Όμως παρατηρούμε ότι η προβολή του $i_n + \vec{u}_n$ μπορεί να τέμνει την προβολή του $j_m + \vec{v}$ αν και μόνο αν κείτονται στο ίδιο κελί, δηλαδή εάν $\vec{u}_n = \vec{v}$. Άρα

$$\begin{aligned}
LK_P(I, J) &= \sum_{1 \leq m \leq l} \sum_{1 \leq n \leq k} \sum_{c \in cr(i_n + \bar{u}_n, j_m + \bar{u}_n)} sign(c) \\
&= \sum_{1 \leq m \leq l} \sum_{1 \leq n \leq k} \sum_{c \in cr(i_n, j_m)} sign(c) = \sum_{c \in cr(i, j)} sign(c) = \left(L(i, j) \right)_{xy}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

□

Χρησιμοποιώντας την ίδια μέθοδο όπως στην απόδειξη της Πρότασης 3.2.8 μπορούμε να δώσουμε μία συνδυαστική απόδειξη της Πρότασης 3.2.6 για συστήματα με μία ή δύο ΠΣΣ. Πρώτα θα χρησιμοποιήσουμε το παρακάτω Λήμμα:

Λήμμα 3.2.9. *Μία γεννήτορας αλυσίδα i είναι κλειστή αν και μόνο αν έχει ένα άρτιο πλήθος σημείων τομών με κάθε έδρα, εκ των οποίων τα μισά ανήκουν σε τόξα τα οποία έχουν κατεύθυνση προς το εσωτερικό του κελιού και τα μισά σε τόξα με κατεύθυνση προς το εξωτερικό.*

Απόδειξη. Έστω ότι προβάλλουμε το περιοδικό σύστημα στο xy -επίπεδο. Τότε με πιθανότητα ένα η προβολή της I_0 είναι μία συλλογή απλών κλειστών καμπύλων, έστω b_i , στο xy -επίπεδο οι οποίες έχουν ένα ή περισσότερα κοινά σημεία (τις αυτο-διασταυρώσεις της προβολής της I_0). Από το Θεώρημα του Jordan κάθε μία από αυτές τις καμπύλες χωρίζει το xy -επίπεδο σε μία εσωτερική και μία εξωτερική περιοχή. Οι προβολές των x - και y -εδρών των κελιών του περιοδικού συστήματος είναι γραμμές παράλληλες στον x - και y -άξονα. Τότε εάν μία γραμμή έρχεται επό μία εξωτερική περιοχή τέμνει μία καμπύλη και εισέρχεται στην εσωτερική περιοχή, τότε θα πρέπει να τέμνει ξανά ώστε να επιστρέψει στην εξωτερική περιοχή. Άρα μία γραμμή μπορεί να τέμνει μία καμπύλη b_i άρτιο πλήθος φορών, τις μισές προς το εσωτερικό, και τις μισές προς το εξωτερικό. Για μία γραμμή παράλληλη προς τον x -άξονα (αντίστ. y -άξονα), κάθε τομή αντιστοιχεί σε μία τομή ενός τόξου της I_0 με την x -έδρα (αντίστ. y -έδρα) ενός κελιού στο περιοδικό σύστημα. Τότε η μεταφορά αυτού του τόξου της I_0 μέσα στο κελί γεννήτορα τέμνει την x -έδρα (αντίστ. y -έδρα) του κελιού γεννήτορα. Το αποτέλεσμα για τις z -έδρες, έπεται προβάλλοντας το περιοδικό σύστημα στο zy -επίπεδο. □

Εναλλακτική απόδειξη της Πρότασης 3.2.6 για μία και δύο ΠΣΣ. Έστω ότι προβάλλουμε τις πραγματοποιήσιμες αλυσίδες στο xy -επίπεδο. Μπορούμε να παραμορφώσουμε τα x - και y -τόξα κλεισίματος έτσι ώστε όταν προβάλλονται ως προς το \vec{k} , να μην τέμνουν την προβολή του κελιού.

$$L(\bar{i}, \bar{j}) = \frac{1}{2} \sum_{c \in cr(\bar{i}, \bar{j})} sign(c) = \frac{1}{2} \left(\sum_{c \in cr(i, j)} sign(c) + \sum_{\substack{c \in cr(\text{κλωσηρε αφρς } i, \\ \text{κλωσηρε αφρς } j)}} sign(c) \right), \tag{3.15}$$

όπου cr ορίζεται όπως στην απόδειξη της Πρότασης 3.2.8. Ας επικεντρωθούμε στον δεύτερο όρο. Από τον ορισμό του τόξου κλεισίματος έπεται ότι σε αυτόν τον όρο συμβάλλουν μόνο οι διασταυρώσεις μεταξύ των x -τόξων κλεισίματος της \bar{i} (ή της \bar{j}) με τα y -τόξα κλεισίματος της \bar{j} (ή \bar{i}). Επίσης, από τον ορισμό των τόξων κλεισίματος έπεται ότι κάθε x -τόξο κλεισίματος της \bar{i} (ή της \bar{j}) τέμνει κάθε y -τόξο κλεισίματος της \bar{j} (ή της \bar{i}) ακριβώς μία φορά και είτε η προβολή όλων των x -τόξων κλεισίματος είναι "πάνω" από την προβολή των y -τόξων κλεισίματος είτε είναι όλα "κάτω". Από το Λήμμα 3.2.9 για κάθε x -τόξο κλεισίματος της \bar{i} υπάρχει ένα άλλο x -τόξο κλεισίματος της \bar{i} με τον αντίθετο προσανατολισμό. Αφού και τα δύο τέμνουν ένα y -τόξο κλεισίματος της \bar{j} (εάν υπάρχει ένα), και είναι και τα δύο από πάνω ή από κάτω από αυτό, το αλγεβρικό άθροισμα αυτών των διασταυρώσεων είναι μηδέν. Άρα

$$L(\bar{i}, \bar{j}) = \frac{1}{2} \sum_{c \in cr(i,j)} \text{sign}(c) = \left(L(i, j) \right)_{xy}. \quad (3.16)$$

Απο την Πρόταση 3.2.8 έχουμε ότι $LK_P(I, J) = \left(L(i, j) \right)_{xy} = L(\bar{i}, \bar{j})$. □

Ιδιότητες του SL_P για κλειστές ελεύθερες αλυσίδες

Παρατηρούμε ότι για κλειστές αλυσίδες, ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης μπορεί να γραφτεί ως

$$SL_P(I) = SI(I_0) + \sum_{\vec{v} \in S} L(I_0, I_0 + \vec{v}), \quad (3.17)$$

όπου S περιέχει όλα τα διανύσματα \vec{v} για τα οποία η $I_0 + \vec{v}$ τέμνει την Σ .

Έπεται ότι ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης έχει τις παρακάτω ιδιότητες στην περίπτωση κλειστών ελεύθερων αλυσίδων:

- (i) SL_P είναι ένα πεπερασμένο άθροισμα.
- (ii) Εάν η αλυσίδα I_0 δεν τέμνει τις έδρες του κελιού, τότε $SL_P(I) = SI(I_0)$.
- (iii) SL_P είναι ένας αχέραιος αριθμός αναλλοίωτος υπό ισοτοπία των αλυσίδων.

Αναφέραμε ότι ο αριθμός αυτο-περιέλιξης μίας κλειστής αλυσίδας l ισούται με τον αριθμό περιέλιξης μεταξύ της l και της καμπύλης κάθετης μεταβολής l_e , δηλαδή $SI(l) = L(l, l_e)$ [10]. Ας δώσουμε τον αντίστοιχο ορισμό για ΠΣΣ:

Ορισμός 3.2.10. Έστω I μία ελεύθερη αλυσίδα σε ένα περιοδικό σύστημα. Ορίζουμε την *ελεύθερη καμπύλη μεταβολής* της να είναι η ελεύθερη αλυσίδα I_e στο περιοδικό σύστημα, τέτοια ώστε καθε εικόνα της I_e να είναι η καμπύλη κάθετης μεταβολής μίας εικόνας της I .

Τότε σε αναλογία με τον τύπο του Calugareanu για αλυσίδες στον \mathbb{R}^3 , το παρακάτω ισχύει για αλυσίδες σε ΠΣΣ:

Πόρισμα 3.2.11. Έστω I μία κλειστή ελεύθερη αλυσίδα σε ΠΣΣ, και έστω I_ϵ η ελεύθερη καμπύλη κάθετης μεταβολής της. Τότε $SL_P(I) = LK_P(I, I_\epsilon)$.

Απόδειξη. Από τον Ορισμό 3.2.10 έχουμε

$$\begin{aligned} LK_P(I, I_\epsilon) &= \sum_v L(I_0, (I_0)_\epsilon + \vec{v}) = L(I_0, (I_0)_\epsilon) + \sum_v L(I_1, (I_0)_\epsilon + \vec{v}) \\ &= Sl(I_0) + \sum_v L(I_0, (I_0)_\epsilon + \vec{v}). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Παρατηρούμε ότι μπορούμε να επιλέξουμε ένα ϵ αρκετά μικρό έτσι ώστε η παραμόρφωση του χρίκου $I_0, I_0 + \vec{v}$ στον $I_0, (I_0)_\epsilon + \vec{v}$ να είναι μία ισοτοπία. Άρα, $L(I_0, I_0 + \vec{v}) = L(I_0, (I_0)_\epsilon + \vec{v})$ για κάθε \vec{v} . Άρα έχουμε την παρακάτω έκφραση για τον περιοδικό αριθμό αυτο-περιέλιξης της ελεύθερης αλυσίδας I στο περιοδικό σύστημα

$$LK_P(I, I_\epsilon) = Sl(I_0) + \sum_v L(I_0, (I_0)_\epsilon + \vec{v}) = Sl(I_0) + \sum_v L(I_0, I_0 + \vec{v}) = SL_P(I). \quad (3.19)$$

□

Πόρισμα 3.2.12. Έστω I μία κλειστή ελεύθερη αλυσίδα σε ΠΣΣ και \bar{i} η αντίστοιχη πραγματοποιήσιμη αλυσίδα. Τότε $SL_P(I) = Sl(\bar{i})$.

Απόδειξη. Έστω \bar{i} και \bar{i}_ϵ οι πραγματοποιήσιμες αλυσίδες των ελεύθερων αλυσίδων I και I_ϵ αντίστοιχα. Τότε από τον ορισμό του I_ϵ , τα τόξα της \bar{i}_ϵ μέσα στο κελί είναι κάθετες μετατοπίσεις της \bar{i}_ϵ . Μπορούμε να επιλέξουμε τα τόξα κλεισίματος της \bar{i}_ϵ έτσι ώστε να είναι επίσης οι κάθετες μετατοπίσεις των τόξων κλεισίματος της \bar{i} . Άρα \bar{i}_ϵ είναι επίσης η ελεύθερη καμπύλη κάθετης μεταβολής της \bar{i} . Έχουμε ότι

$$SL_P(I) = LK_P(I, I_\epsilon) = L(\bar{i}, \bar{i}_\epsilon) = Sl(\bar{i}). \quad (3.20)$$

□

3.2.2 Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης ανοικτών αλυσίδων

Ο αριθμός περιέλιξης ανοικτών αλυσίδων δεν είναι ποτέ μηδέν ακόμα και αν οι αλυσίδες είναι μακριά η μία από την άλλη. Άρα, στην περίπτωση ανοικτών ελεύθερων αλυσίδων ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης είναι ένα άπειρο άθροισμα. Θα μελετήσουμε την σύγκλιση αυτού του αθροίσματος στην περίπτωση ενός συστήματος με μία, δύο και τρεις ΠΣΣ.

Έστω I και J δύο ελεύθερες αλυσίδες. Έστω επίσης \mathbb{LZ}^3 το ακέραιο πλέγμα μονάδας μήκους l , όπου l είναι το μήκος μίας ακμής του κελιού. Παρατηρούμε ότι κάθε διάνυσμα \vec{v} στο \mathbb{LZ}^3 μπορεί να εκφραστεί ως $\vec{v} = ml(v_1, v_2, v_3)$ όπου $m \in \mathbb{N}$, $v_i \in \mathbb{Z}$ και $\gcd(v_1, v_2, v_3) = 1$, όπου από το $\gcd(v_1, v_2, v_3)$ εννοούμε τον \gcd των μη μηδενικών συντεταγμένων από τους v_1, v_2, v_3 . Άρα μπορούμε να εκφράσουμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης ως:

$$\begin{aligned} LK_P(I, J) &= \sum_{v'_1, v'_2, v'_3 \in \mathbb{LZ}} L(I_0, J_0 + (v'_1, v'_2, v'_3)) \\ &= \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{\substack{v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{Z} \\ \gcd(v_1, v_2, v_3) = 1}} L(I_0, J_0 + ml(v_1, v_2, v_3)). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Στη συνέχεια θα θεωρήσουμε ότι, χωρίς βλάβη της γενικότητας, οι I και J είναι κατά τμήματα γραμμικές. Θα δείξουμε ότι τότε ο $LK_P(I, J)$ μπορεί να εκφραστεί σαν το άθροισμα των περιοδικών αριθμών περιέλιξης των ακμών που αποτελούν τις I και J . Παρατηρήστε επίσης ότι από τον ορισμό ενός ξεδιπλώματος μίας γεννήτορα αλυσίδα, τα ξεδιπλώματα των I_0 και J_0 της i και j αποτελούνται από συγκεκριμένες μεταφορές των ακμών που αποτελούν τις i και j αντίστοιχα, όπου τα διανύσματα μεταφοράς δεν είναι κατ'ανάγκη όλα τα ίδια.

Λήμμα 3.2.13. Έστω $e_{i,k}, k = 1, \dots, n_i$ οι ακμές που αποτελούν την γεννήτορα αλυσίδα i και έστω $e_{j,k'}, k' = 1, \dots, n_j$ οι ακμές που αποτελούν την γεννήτορα αλυσίδα j . Τότε δύο ακμές $e_{i,k}, e_{j,k'}$ παράγουν δύο ελεύθερες αλυσίδες $E_{i,k}, E_{j,k'}$ αντίστ. στο περιοδικό σύστημα. Τότε ο LK_P μπορεί να εκφραστεί ως:

$$LK_P(I, J) = \sum_k \sum_{k'} LK_P(E_{i,k}, E_{j,k'}). \quad (3.22)$$

Απόδειξη. Έστω $\beta_{i,k}, \beta_{j,k'}$ τα σημεία βάσης των ακμών $e_{i,k}, e_{j,k'}, k = 1, \dots, n_i, k' = 1, \dots, n_j$. Έστω επίσης $e_{i,1} + \vec{u}_1, \dots, e_{i,n_i} + \vec{u}_{n_i}$ οι εικόνες των ελεύθερων αλυσίδων $E_{i,k}, k = 1, \dots, n_i$, που αποτελούν την I_0 , και έστω $e_{j,1} + \vec{w}_1, \dots, e_{j,n_j} + \vec{w}_{n_j}$ οι εικόνες των ελεύθερων αλυσίδων $E_{j,k'}, k' = 1, \dots, n_j$, που αποτελούν την J_0 . Τότε ο $LK_P(I, J)$ μπορεί να εκφραστεί ως

$$\begin{aligned} LK_P(I, J) &= \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{\substack{v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{Z} \\ \gcd(v_1, v_2, v_3) = 1}} \sum_{1 \leq k \leq n_i} \sum_{1 \leq k' \leq n_j} L(e_{i,k} + \vec{u}_k, e_{j,k'} + \vec{w}_{k'} + ml(v_1, v_2, v_3)) \\ &= \sum_{1 \leq k \leq n_i} \sum_{1 \leq k' \leq n_j} \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{\substack{v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{Z} \\ \gcd(v_1, v_2, v_3) = 1}} L(e_{i,k} + \vec{u}_k, e_{j,k'} + \vec{w}_{k'} + ml(v_1, v_2, v_3)). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Αφού τα μήκη των I_0 και J_0 είναι πεπερασμένα (δηλαδή $n_i, n_j < \infty$), για να αποδείξουμε την σύγκλιση του LK_P αρκεί από την Εξ. 3.23 να αποδείξουμε σύγκλιση για κάθε όρο της μορφής

$$\sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{\substack{v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{Z} \\ \gcd(v_1, v_2, v_3) = 1}} L(e_{i,k} + \vec{u}_k, e_{j,k'} + \vec{w}_{k'} + ml(v_1, v_2, v_3)), \quad (3.24)$$

που ισούται με τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης των ελεύθερων αλυσίδων $E_{i,k}, E_{j,k'}, LK_P(E_{i,k}, E_{j,k'})$. \square

Σημείωση 3.2.14. Στη συνέχεια της απόδειξης, για να αποφύγουμε τους πολύπλοκους δείκτες θα χρησιμοποιήσουμε τον συμβολισμό I, J για τις ελεύθερες αλυσίδες $E_{i,k}, E_{j,k'}$. Παρατηρούμε ότι αυτές είναι ελεύθερες αλυσίδες των οποίων οι εικόνες είναι ευθύγραμμα τμήματα (ακμές). Θα ονομάζουμε τέτοιες ελεύθερες αλυσίδες *ελεύθερες ακμές*.

Έστω b_I, b_J οποιοδήποτε δύο εικόνων των ελεύθερων ακμών I, J , τότε $b_I, b_J < l$. Χωρίς βλάβη της γενικότητας στη συνέχεια θα θεωρούμε ότι $b_I = b_J = b < l/2$.

3.2.2.1 Αριθμητικές συναρτήσεις

Σε αυτή την παράγραφο παραθέτουμε γνωστά αποτελέσματα για τις αριθμητικές συναρτήσεις τα οποία θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια.

Σημεία πλέγματος πάνω σε έναν κύκλο ή σε μία σφαίρα

Έστω $r_2(n) = \{v_1, v_2 \in \mathbb{Z} : v_1^2 + v_2^2 = n\}$, το πλήθος των αναπαραστάσεων ενός αριθμού σαν άθροισμα δύο τετραγώνων, $R_2(n) = \{v_1, v_2 \in \mathbb{Z}, \gcd(v_1, v_2) = 1 : v_1^2 + v_2^2 = n\}$ το πλήθος των πρωτογενών αναπαραστάσεων ενός αριθμού σαν άθροισμα δύο τετραγώνων, $r_3(n) = \{v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{Z} : v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = n\}$ το πλήθος των αναπαραστάσεων ενός αριθμού σαν το άθροισμα τριών τετραγώνων, και $R_3(n) = \{v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{Z}, \gcd(v_1, v_2, v_3) = 1 : v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = n\}$ το πλήθος των πρωτογενών αναπαραστάσεων ενός αριθμού σαν το άθροισμα τριών τετραγώνων. Ακριβείς εκφράσεις αυτών των συναρτήσεων μπορούν να βρεθούν στα [13, 38, 48]. Πιο συγκεκριμένα, ο Jacobi [61] απέδειξε ότι

$$r_2(n) = 4(d_1(n) - d_3(n)), \quad (3.25)$$

όπου $d_i(n) = i \pmod{4}$, και ο Bateman [13] απέδειξε ότι

$$r_3(n) = \frac{16}{\pi} \sqrt{n} L(1, \chi) q(n) P(n), \quad (3.26)$$

όπου $n = 4^0 n_1$ εάν το 4 δεν διαιρεί το n , $q(n) = 0$, εάν $n_1 = 7 \pmod{8}$, ή $q(n) = 2^{-a}$ εάν $n_1 = 3 \pmod{8}$, ή $q(n) = 3 \cdot 2^{-a-1}$ εάν $n_1 = 1, 2, 5$ ή $6 \pmod{8}$, και

$$P(n) = \prod_{\substack{p^{2b}|n \\ p \text{ odd}}} \left[1 + \sum_{j=1}^{b-1} p^{-j} + p^{-b} \left(1 - \left[\frac{(-n/p^{2b})}{p} \right] \frac{1}{p} \right)^{-1} \right], \quad (3.27)$$

$P(n) = 1$ για μη τετραγωνικό n , και $L(S, \chi) = \sum_{m=1}^{\infty} \chi(m) m^{-S}$ με $\chi(m)$, το σύμβολο Legendre-Jacobi-Kronecker: $\chi(m) = \left(\frac{-4}{m} \right)$, $\chi(m) = 1$ εάν $m = 1 \pmod{4}$, $\chi(m) = 0$ εάν $m = 0 \pmod{2}$ και $\chi(m) = -1$ εάν $m = 3 \pmod{4}$.

Έστω ότι η ανάλυση πρώτων παραγόντων του n δίνεται από

$$n = 2^{\lambda_2} \prod_p p^{\lambda_p}, \quad (3.28)$$

όπου το γινόμενο είναι πάνω από όλους τους περιττούς πρώτους p που διαιρούν το n . Τότε

$$R_2(n) = c_2(n) \prod_p (1 + (-1)^{(p-1)/2}), \quad (3.29)$$

όπου $c_2(n) = 0$ εάν $n = 0 \pmod{4}$ και $c_2(n) = 4$ εάν $n \neq 0 \pmod{4}$.

Έστω m το μη τετραγωνικό μέρος του n , έστω $k \geq 1$ και έστω $\left(\frac{a}{p} \right)$ το σύμβολο Legendre. Τότε

$$R_3(n) = c_3(n) r_3(m) \frac{n^{1/2}}{m^{1/2}} \prod_{p|\frac{n}{m}} \left(1 - \frac{\left(\frac{-m}{p} \right)}{p} \right), \quad (3.30)$$

όπου $c_3(n) = 1$ εάν $n \neq 0 \pmod{4}$ ή $c_3(n) = 0$ εάν $n = 0 \pmod{4}$. Τότε $r_3(n)$ και $R_3(n)$ σχετίζονται ως

$$r_3(n) = \sum_{d^2|n} R_3(n/d^2). \quad (3.31)$$

Στη συνέχεια, θα ενδιαφερθούμε για την αυξητική τάση αυτών των συναρτήσεων, η οποία δεν είναι προφανής από τις παραπάνω εκφράσεις των $r_2(n), R_2(n), r_3(n), R_3(n)$. Ο απλοικός τρόπος για να βρούμε την αυξητική τάση του $r_d(n)$ για $d = 2, 3$, είναι να χρησιμοποιήσουμε τον όγκο μίας μπάλας διά το πλήθος των σφαιρών που περιέχονται σε αυτή. Ο όγκος μίας μπάλας ακτίνας \sqrt{n} αυξάνει σαν το $n^{d/2}$ ενώ το πλήθος των σφαιρών είναι n . Για $d = 2$, αυτό μας κάνει να περιμένουμε έναν σταθερό αριθμό σημείων πλέγματος πάνε σε έναν κύκλο, για $d = 3$ μία αυξητική τάση ανάλογη του \sqrt{n} . Ωστόσο, όπως φαίνεται στην Εξ. 3.25, η αύξηση είναι μη ταχτική και εξαρτάται από την δομή των διαιρετών του n . Για παράδειγμα,

για $d = 2$, οι περισσότεροι κύκλοι δεν έχουν καθόλου σημεία πλέγματος. Για την ακρίβεια, ο Landau απέδειξε ότι το πλήθος των κύκλων με τουλάχιστον ένα σημείο πλέγματος, με αθέραια τετραγωνική ακτίνα μικρότερη του x , αυξάνει σαν $Cx/\sqrt{\log x}$ [80]. Επιπλέον, υπάρχουν άπειρες οικογένειες κύκλων με πολύ λίγα σημεία πλέγματος. Από την άλλη, το πλήθος των σημείων πλέγματος σε έναν κύκλο δεν είναι φραγμένο. Για $d = 3$ αποδεικνύεται ότι το πλήθος των σημείων πλέγματος και της απλοϊκής εκτίμησης είναι φραγμένο από πάνω από το n^ϵ , και από κάτω από το $n^{-\epsilon}$ για κάθε $\epsilon > 0$. Πιο συγκεκριμένα, στο [23] αποδεικνύεται ότι $r_3(n) = O(\sqrt{n}(\log n)^2)$.

Για τις αριθμητικές μας εκτιμήσεις στις Παρατηρήσεις 3.3.8, 3.3.13 και 3.3.17, για μεγάλο n , θα κάνουμε τις προσεγγίσεις: $r_2(n) \approx \pi$, $R_2(n) \approx \frac{6}{\pi}$, $r_3(n) = \frac{4\pi}{3}\sqrt{n}$ και $R_3(n) \approx \frac{4\pi}{3\zeta(3)}\sqrt{n}$.

Σημεία πλέγματος μέσα σε έναν κύκλο ή μία σφαίρα

Ένα άλλο σχετικό πρόβλημα είναι η εκτίμηση του πλήθους των σημείων πλέγματος μέσα σε έναν κύκλο ή μία σφαίρα. Εκτιμήσεις για το πλήθος των σημείων πλέγματος μέσα σε έναν κύκλο ή μία σφαίρα βρίσκονται στα [53, 22]. Πιο συγκεκριμένα, από το [53] γνωρίζουμε ότι το πλήθος των σημείων πλέγματος μέσα σε έναν κύκλο ακτίνας \sqrt{n} είναι

$$\sum_{1 \leq m \leq n} r_2(m) = \pi n + O(n^{7/22}). \quad (3.32)$$

Επίσης, από το [53] γνωρίζουμε ότι το πλήθος των πρωτογενών σημείων πλέγματος μέσα σε έναν κύκλο ακτίνας \sqrt{n} είναι:

$$\sum_{1 \leq m \leq n} R_2(m) = \frac{6}{\pi} + O(n^{(51+\epsilon)/100}). \quad (3.33)$$

Από το [22] γνωρίζουμε ότι το πλήθος των σημείων πλέγματος μέσα σε μία σφαίρα ακτίνας \sqrt{n} ισούται με

$$\sum_{1 \leq m \leq n} r_3(m) = \frac{4\pi}{3}n\sqrt{n} + O(n^{21/32+\epsilon}), \quad (3.34)$$

για κάθε $\epsilon > 0$. Επίσης από το [22] γνωρίζουμε ότι το πλήθος των πρωτογενών σημείων πλέγματος μέσα σε μία σφαίρα ακτίνας \sqrt{n} είναι:

$$\sum_{1 \leq m \leq n} R_3(m) = \frac{4\pi}{3\zeta(3)}n\sqrt{n} + O(\sqrt{n}(\log \sqrt{n})^{1/2}) \quad (3.35)$$

3.2.2.2 Το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss για δύο ακμές

Έστω e_1, e_2 δύο ακμές στον 3-διάστατο χώρο με παραμετροποιήσεις $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$, και έστω \vec{a} το διάνυσμα που ενώνει το σημείο βάσης του e_1 στο σημείο βάσης του e_2 . Χωρίς βλάβη της γενικότητας, έστω ότι έχουν το ίδιο μήκος b . Το ολοκλήρωμα κατά Gauss των e_1, e_2 εκφράζεται ως

$$\begin{aligned} L(e_1, e_2) &= \frac{1}{4\pi} \int \int \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)\|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \int \int \frac{\|\dot{\gamma}_1(t)\| \|\dot{\gamma}_2(s)\| \|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)\| \sin \phi \cos \theta}{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)\|^3} dt ds \\ &= \frac{1}{4\pi} \int \int \frac{\sin \phi \cos \theta(s, t)}{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)\|^2} dt ds, \end{aligned} \quad (3.36)$$

όπου ϕ είναι η γωνία μεταξύ των δύο ακμών (παρατηρείστε ότι η ϕ είναι σταθερή υπό μεταφορές των ακμών) και $\theta(s, t)$ είναι η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ και $\gamma_1(t) - \gamma_2(s)$.

Λήμμα 3.2.15. Για δύο ακμές e_1, e_2 μήκους b τα σημεία βάσης των οποίων συνδέονται με ένα διάνυσμα \vec{a}

$$|L(e_1, e_2)| \leq \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(\|\vec{a}\| - b)^2}. \quad (3.37)$$

Απόδειξη. Από την Εξ. 3.36,

$$\begin{aligned} |L(e_1, e_2)| &\leq \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\min_{t,s} \{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)\|^2\}} \left| \int \int \sin \phi \cos \theta(s, t) dt ds \right| \\ &\leq \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(\|\vec{a}\| - b)^2}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

□

Έστω ότι η διαμορφωση των δύο ακμών αλλάζει, σαν συνάρτηση του χρόνου, τ . Δηλαδή, έστω $\gamma_1(t, \tau) = (X_t^{(1)}(\tau), X_t^{(2)}(\tau), X_t^{(3)}(\tau))$, $\gamma_2(s, \tau) = (Y_s^{(1)}(\tau), Y_s^{(2)}(\tau), Y_s^{(3)}(\tau))$. Τότε το ολοκλήρωμα περιέλιξης μπορεί επίσης να αλλάξει.

Λήμμα 3.2.16. Έστω $e_1(\tau), e_2(\tau) \in \Omega$ δύο ακμές μήκους b τα σημεία βάσης των οποίων συνδέονται με ένα διάνυσμα $\vec{a}(\tau)$. Τότε σε ένα διάστημα $[\tau_1, \tau_2]$ όπου το πρόσημο του $L(e_1(\tau), e_2(\tau))$ είναι σταθερό

$$\left| \frac{d}{d\tau} (L(e_1(\tau), e_2(\tau))) \right| \leq \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(\|\vec{a}\| - b)^2} \left(1 + \frac{\|\vec{a}'(\tau)\|}{(\|\vec{a}\| - b)} \right). \quad (3.39)$$

Απόδειξη. Έστω $\sigma_{1,2}$ το πρόσημο του $L(e_1(\tau), e_2(\tau))$, $\tau \in [\tau_1, \tau_2]$. Τότε

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}(L(e_1(\tau), e_2(\tau))) &= \frac{d}{d\tau} \left(\frac{1}{4\pi} \sigma_{i,j} \int \int \frac{\cos \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau)}{\|\gamma_1(\tau, t) - \gamma_2(\tau, s)\|^2} ds dt \right) \\ &= \frac{\sigma_{i,j}}{4\pi} \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\frac{d}{d\tau} \int \int \frac{\cos \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau)}{(X_t^{(1)}(\tau) - Y_s^{(1)}(\tau))^2 + (X_t^{(2)}(\tau) - Y_s^{(2)}(\tau))^2 + (X_t^{(3)}(\tau) - Y_s^{(3)}(\tau))^2} ds dt.$$

Έστω

$$\Lambda(s, t, \tau) = \frac{\cos \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau)}{(X_t^{(1)}(\tau) - Y_s^{(1)}(\tau))^2 + (X_t^{(2)}(\tau) - Y_s^{(2)}(\tau))^2 + (X_t^{(3)}(\tau) - Y_s^{(3)}(\tau))^2}. \quad (3.41)$$

Τότε η $\Lambda(s, t, \tau)$ είναι συνεχής στο $[0, 1] \times [0, 1] \times [\tau_1, \tau_2]$. Η παράγωγος κατά μέρος της Λ_τ είναι

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}(\Lambda(s, t, \tau)) &= \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\cos \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau)}{(X_t^{(1)}(\tau) - Y_s^{(1)}(\tau))^2 + (X_t^{(2)}(\tau) - Y_s^{(2)}(\tau))^2 + (X_t^{(3)}(\tau) - Y_s^{(3)}(\tau))^2} \right) \\ &= \frac{-\sin \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau) \frac{d\theta}{d\tau} + \cos \theta(\tau, t, s) \cos \phi(\tau) \frac{d\phi}{d\tau}}{\|\gamma_1(\tau) - \gamma_2(\tau)\|^2} \\ &\quad - 2 \frac{\cos \theta_1(\tau, t, s) \sin \phi(\tau)}{\|\gamma_1(\tau) - \gamma_2(\tau)\|^4} (\gamma_1(\tau) - \gamma_2(\tau)) \cdot \frac{d(\gamma_1(\tau, t) - \gamma_2(\tau, s))}{d\tau}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Άρα η Λ_τ είναι φραγμένη από πάνω από

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}(\Lambda(s, t, \tau)) &\leq \left| \frac{-\sin \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau) \frac{d\theta}{d\tau} + \cos \theta(\tau, t, s) \cos \phi(\tau) \frac{d\phi}{d\tau}}{\|\gamma_1(\tau, t) - \gamma_2(\tau, s)\|^2} \right| \\ &\quad + 2 \left| \frac{\cos \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau)}{\|\gamma_1(\tau, t) - \gamma_2(\tau, s)\|^4} \|\gamma_1(\tau, t) - \gamma_2(\tau, s)\| \left\| \frac{d(\gamma_1(\tau, t) - \gamma_2(\tau, s))}{d\tau} \right\| \right| \\ &\leq \frac{1}{\min_{t,s} \{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)\|^2\}} \left| -\sin \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau) \frac{d\theta}{d\tau} + \cos \theta(\tau, t, s) \cos \phi(\tau) \frac{d\phi}{d\tau} \right| \\ &\quad + \frac{2}{\min_{t,s} \{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)\|^3\}} |\cos \theta(\tau, t, s) \sin \phi(\tau)| \left\| \frac{d(\gamma_1(\tau, t) - \gamma_2(\tau, s))}{d\tau} \right\| \\ &\leq \frac{2}{(\|\vec{\alpha}(\tau)\| - b)^2} + \frac{2\|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{(\|\vec{\alpha}(\tau)\| - b)^3}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Αφού οι $\Lambda(s, t, \tau)$ και $\frac{d}{d\tau} \Lambda(s, t, \tau)$ είναι συνεχείς στο $[0, 1] \times [0, 1] \times [\tau_1, \tau_2]$ από τον κανόνα ολοκλήρωσης κατά Leibnitz

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\tau} (L(e_1(\tau), e_2(\tau))) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int \int \frac{d}{d\tau} (\Lambda(s, t, \tau)) ds dt \leq \frac{1}{4\pi} \left(\frac{2}{(\|\vec{\alpha}(\tau)\| - b)^2} + \frac{2\|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{(\|\vec{\alpha}(\tau)\| - b)^3} \right). \end{aligned} \quad (3.44)$$

□

3.3 Σύγκλιση του LK_P για ανοικτές ελεύθερες αλυσίδες

Σε αυτή την παράγραφο παρουσιάζεται η απόδειξη της σύγκλισης του LK_P για ανοικτές ελεύθερες αλυσίδες. Στη συνέχεια, έστω I, J δύο ελεύθερες ακμές οι εικόνες των οποίων είναι ευθύγραμμα τμήματα μήκους $b < l/2$, όπου l είναι το μήκος μίας έδρας του κελιού.

3.3.1 Σύγκλιση σε μία ΠΣΣ

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, ας θεωρήσουμε την περίπτωση μίας ΠΣΣ που επιβάλλεται στον x -άξονα (δεξιές - αριστερές έδρες του κελιού). Τότε ο περιοδικός αριθμός σπεριέλιξης των δύο ελεύθερων ακμών μπορεί να γραφτεί ως

$$LK_P(I, J) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} L(I_0, J_0 + m(l, 0, 0)). \quad (3.45)$$

Έστω $\vec{\alpha}$ το διάνυσμα που ενώνει το σημείο βάσης της I_0 , β_i , στο σημείο βάσης της J_0 , β_j . Παρατηρούμε ότι μπορούμε πάντα να επιλέξουμε την θέση του κελιού γεννήτορα έτσι ώστε $\|\vec{\alpha}\| < \frac{l}{2}$. Έστω $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$, $t, s \in [0, 1]$ οι παραμετροποιήσεις των I_0 και J_0 αντίστοιχα. Τότε:

Πρόταση 3.3.1. *Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης μεταξύ δύο ελεύθερων αλυσίδων σε μία ΠΣΣ συγκλίνει.*

Απόδειξη. Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης μπορεί να γραφτεί ως

$$\begin{aligned} LK_P(I, J) &\leq \sum_{m \in \mathbb{Z}} |L(I_0, J_0 + ml(1, 0, 0))| \\ &= \sum_{m \in \mathbb{N}} |L(I_0, J_0 - ml(1, 0, 0))| + |L(I_0, J_0)| + \sum_{m \in \mathbb{N}} |L(I_0, J_0 + ml(1, 0, 0))|, \end{aligned} \quad (3.46)$$

όπου $|L(I_0, J_0)| < \frac{1}{2}$. Επίσης, παρατηρούμε ότι

$$\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s) \pm ml\vec{v}\| \geq \min_{t,s} \|\gamma_1(t) - \gamma_2(s) \pm ml\vec{v}\| \geq ml\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}\| - b.$$

Άρα, από την Εξ. 3.38

$$\begin{aligned} |L(I_0, J_0 + ml(1, 0, 0))| &\leq \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(ml - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} \left| \int \int \sin \phi \cos \theta(s, t) dt ds \right| \\ &\leq \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(ml - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} := Q_{m,1}^{(1)}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

και όμοια για το $|L(I_0, J_0 - ml(1, 0, 0))|$. Άρα,

$$\begin{aligned} \sum_{m \in \mathbb{Z}} |L(I_0, J_0 + ml(1, 0, 0))| &< L(I_0, J_0) + \sum_{m \in \mathbb{Z}, m \neq 1} Q_{m,1}^{(1)} \\ &\leq \frac{1}{4\pi} \sum_{m \in \mathbb{N}} \frac{1}{(ml - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi} \sum_{m \in \mathbb{N}} \frac{1}{(ml - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} \\ &< \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \sum_{m \in \mathbb{N}} \frac{1}{(ml - \|\vec{\alpha}\| - b)^2}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

όπου $\|\vec{\alpha}\| > \frac{l}{2}$, $b < l/2$. Άρα για $m = 1$, $\frac{1}{l - \|\vec{\alpha}\| - b} < \frac{1}{l/2 - b}$ και για $m > 1$, $\frac{1}{ml - \|\vec{\alpha}\| - b} < \frac{1}{(m-1)l}$. Άρα

$$\begin{aligned} \sum_{m \in \mathbb{Z}} |L(I_0, J_0 + ml(1, 0, 0))| &< \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(l/2 - b)^2} + \frac{1}{2\pi} \sum_{m > 1 \in \mathbb{N}} \frac{1}{((m-1)l)^2} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi(l-2b)^2} + \frac{\zeta(2)}{l^2} < \infty, \end{aligned} \quad (3.49)$$

και η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη. □

Παρατήρηση 3.3.2. Παρατηρούμε ότι για ένα κελί με μία ΠΣΣ μήκους ακμής $l = 50$ και για ακμές μήκους $b = 1$, διαστάσεις κατάλληλες για ποσομιώσεις πολυμερικών τηγμάτων, η Εξ. 3.49 δίνει $LK_P(I, J) < 0.500762$.

Πόρισμα 3.3.3. Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης δύο ανοικτών ελεύθερων αλυσίδων σε μία ΠΣΣ είναι συνεχής συνάρτηση των συντεταγμένων των αλυσίδων σχεδόν παντού.

Απόδειξη. Αφού η σύγκλιση του LK_P είναι ομοιόμορφη, έπεται από το γεγονός ότι το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss είναι συνεχής συνάρτηση στον χώρο των διαμορφώσεων σχεδόν παντού. □

3.3.2 Σύγκλιση σε δύο ΠΣΣ

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, ας θεωρήσουμε δύο ΠΣΣ που επιβάλλονται στους x - και y -άξονες (δεξιές - αριστερές και πάνω - κάτω έδρες του κελιού). Για να αποδείξουμε σύγκλιση του $LK_P(I, J)$ στην περίπτωση δύο ΠΣΣ πρέπει να λάβουμε υπόψη τα πρόσημα των αριθμών περιέλιξης που περιέχονται στο άθροισμα. Στη συνέχεια η μεταφορά της J_0 κατά $ml\vec{v}$ και κατά $-ml\vec{v}$ θα ονομάζονται *αντίθετες μεταφορές*. Όπως θα δούμε, ο αριθμός περιέλιξης της I_0 με αυτές μπορεί να έχει αντίθετο πρόσημο.

Λήμμα 3.3.4. Έστω e_1, e_2 δύο ακμές των οποίων το σημείο βάσης συνδέονται με ένα διάνυσμα $\vec{\alpha}$, τότε $L(e_1, e_2) = -L(e_1, e_2 - 2\vec{\alpha})$.

Απόδειξη. Έστω ένας καθρέφτης M τοποθετημένος σε ένα επίπεδο με κάθετο διάνυσμα $\vec{\alpha}$ το οποίο περιέχει το β_i , όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.6, και έστω $(e_1)_M$ και $(e_2)_M$ οι κατοπτρικές εικόνες των e_1 και e_2 (φαίνονται με μπλέ στην Εικόνα 3.6). Τότε $L((e_1)_M, (e_2)_M) = -L(e_1, e_2)$. Ας περιστρέψουμε τις $(e_1)_M$ και $(e_2)_M$ γύρω από την γραμμή που περιέχει το $\vec{\alpha}$ κατά π και έστω $((e_2)_M)_R$ και $((e_1)_M)_R$ οι ακμές που προκύπτουν (φαίνονται με ανοικτό μπλε στην Εικόνα 3.6). Κατά την περιστροφή η σχετική θέση των ακμών δεν αλλάζει, άρα $L(((e_1)_M)_R, (((e_2)_M)_R)) = L((e_1)_M, (e_2)_M) = -L(e_1, e_2)$. Παρατηρήστε ότι οι $((e_2)_M)_R$ και $((e_1)_M)_R$, κείτονται πάνω στις ακμές $e_2 - 2\vec{\alpha}$ και e_1 αντίστοιχα, αλλά έχουν αντίθετο προσανατολισμό από τις $e_2 - 2\vec{\alpha}$ και e_1 . Εάν αντιστραφεί ο προσανατολισμός των $((e_2)_M)_R$ και $((e_1)_M)_R$, τότε ο αριθμός περιέλιξής τους δεν αλλάζει, άρα $L(e_1, e_2 - 2\vec{\alpha}) = L(-((e_1)_M)_R, -(((e_2)_M)_R)) = L(((e_1)_M)_R, (((e_2)_M)_R)) = -L(e_1, e_2)$. □

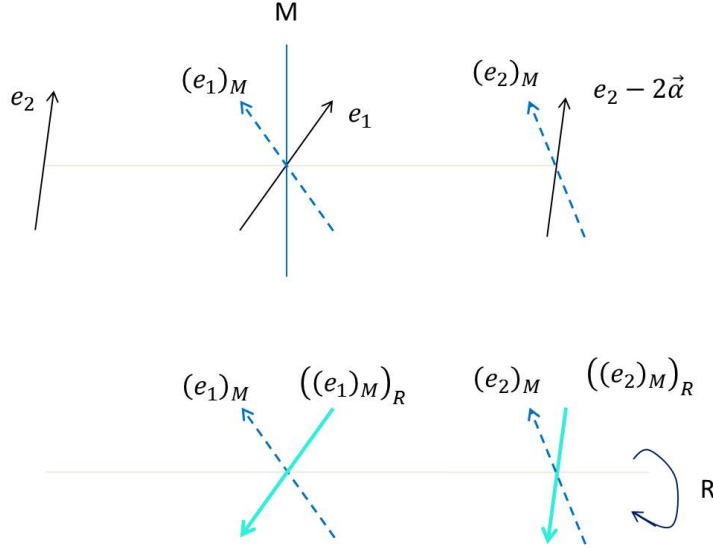
Πόρισμα 3.3.5. Έστω e_1, e_2 δύο ακμές των οποίων τα σημεία βάσης ενώνονται με ένα διάνυσμα $\vec{\alpha}$, τότε

$$L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) + L(e_1, e_2 - ml\vec{v}) = L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) - L(e_1, e_2 + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}). \quad (3.50)$$

Απόδειξη. Παρατηρήστε ότι τα σημεία βάσης των ακμών e_1 και $e'_2 = e_2 - ml\vec{v}$ ενώνονται με ένα διάνυσμα $\vec{\alpha}' = \vec{\alpha} - ml\vec{v}$ (δείτε Εικόνα 3.7). Άρα από το Λήμμα 3.3.4

$$\begin{aligned} L(e_1, e_2 - ml\vec{v}) &= L(e_1, e'_2) = -L(e_1, e'_2 - 2\vec{\alpha}') = -L(e_1, e_2 - ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}') \\ &= -L(e_1, e_2 - ml\vec{v} - 2(\vec{\alpha} - ml\vec{v})) = -L(e_1, e_2 + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}). \end{aligned} \quad (3.51)$$

□



Σχήμα 3.6: Πάνω: $L(e_1, e_2) = -L((e_1)_M, (e_2)_M)$. Κάτω: $L((e_1)_M, (e_2)_M) = L(((e_1)_M)_R, ((e_2)_M)_R) = L(e_1, e_2 - 2\vec{\alpha})$.

Για το άθροισμα των ολοκληρωμάτων περιέλιξης δύο αντίθετων μεταφορών:

Λήμμα 3.3.6. Έστω e_1, e_2 δύο ακμές τα σημεία βάσης των οποίων συνδέονται με ένα διά-
νυσμα $\vec{\alpha}$, τότε για $ml\|\vec{v}\| \gg \|\vec{\alpha}\|$,

$$|L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) + L(e_1, e_2 - ml\vec{v})| < \frac{2}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \frac{1}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3}. \quad (3.52)$$

Απόδειξη. Έστω $\gamma_1(\tau), \gamma_2(s), t, s \in [0, 1]$ οι παραμετρικοποιήσεις των ακμών e_1, e_2 αντίστοιχα.
Βψ Λεμμα 3.3.5:

$$\begin{aligned} L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) + L(e_1, e_2 - ml\vec{v}) &= L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) - L(e_1, e_2 + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}) \\ &= \frac{1}{4\pi} \left(\int \int \frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\gamma_1(t) - \gamma_2(s) + ml\vec{v})}{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s) + ml\vec{v}\|^3} ds dt \right. \\ &\quad \left. - \int \int \frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\gamma_1(t) - \gamma_2(s) + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha})}{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s) + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} ds dt \right). \end{aligned} \quad (3.53)$$

Για μεγάλο $ml\|\vec{v}\|$, οι όροι στο ολοκλήρωμα μπορούν να προσεγγιστούν, για κάθε (s, t) , από τις τιμές τους στο (t_1, s_1) , όπου $\gamma_1(t_1) = \beta_1$ και $\gamma_2(s_1) = \beta_2$. Για απλοποίηση θα συμβολίζουμε $\gamma_1(t_1) = \gamma_1, \gamma_2(s_2) = \gamma_2$. Παρατηρείστε ότι τότε $\vec{\alpha} = \gamma_1 - \gamma_2$ άρα η εξίσωση 3.53 γίνεται:

$$\begin{aligned}
 & L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) - L(e_1, e_2 + ml\vec{v} + 2\vec{\alpha}) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \left(\frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\vec{\alpha} + ml\vec{v})}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v}\|^3} - \frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha})}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} \right) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \left(\frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\vec{\alpha} + ml\vec{v})}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v}\|^3} - \frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\vec{\alpha} + ml\vec{v})}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} + \frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot 2\vec{\alpha}}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} \right) \quad (3.54) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \left((\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\vec{\alpha} + ml\vec{v}) \left(\frac{1}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v}\|^3} - \frac{1}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot 2\vec{\alpha}}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} \right).
 \end{aligned}$$

Τότε, χρησιμοποιώντας το Θεώρημα Μέσης Τιμής του Απειροστικού Λογισμού, για την συνάρτηση $h(\|ml\vec{v} + \vec{\alpha}\|) = \frac{1}{\|ml\vec{v} + \vec{\alpha}\|^3}$ για $ml\|\vec{v}\| \gg \|\vec{\alpha}\|$, $\frac{1}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v}\|^3} - \frac{1}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3}$ στην Εξ. 3.54 μπορεί να προσεγγιστεί από

$$\frac{\partial}{\partial(\|ml\vec{v} + \vec{\alpha}\|)} h(\|ml\vec{v} + \vec{\alpha}\|) \approx \frac{-6\|\vec{\alpha}\|}{\|ml\vec{v} + \vec{\alpha}\|^4}. \quad (3.55)$$

Άρα:

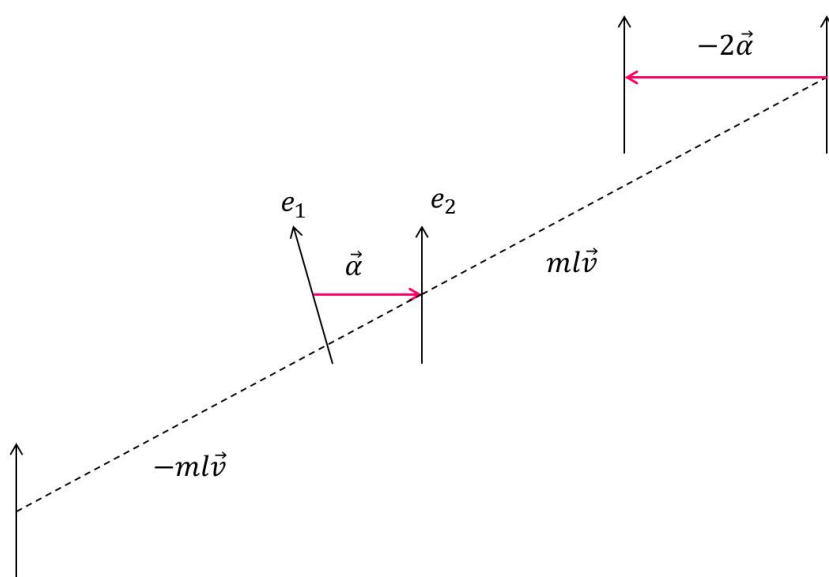
$$\begin{aligned}
 & L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) + L(e_1, e_2 - ml\vec{v}) \\
 &\approx \frac{1}{4\pi} \left((\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot (\vec{\alpha} + ml\vec{v}) \frac{-6\|\vec{\alpha}\|}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v}\|^4} + \frac{(\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2) \cdot 2\vec{\alpha}}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} \right) \quad (3.56) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \left(\sin \phi \cos \theta \frac{-6\|\vec{\alpha}\|}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v}\|^3} + \sin \phi \cos \psi \frac{2\|\vec{\alpha}\|}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v} - 2\vec{\alpha}\|^3} \right),
 \end{aligned}$$

όπου ϕ η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1$ και $\dot{\gamma}_2$, θ η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ και $\vec{\alpha} + ml\vec{v}$, και ψ η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ και $\vec{\alpha}$. Άρα,

$$\begin{aligned}
 & |L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) + L(e_1, e_2 - ml\vec{v})| \\
 &< \frac{1}{2\pi} \|\vec{\alpha}\| \sin \phi \left(\frac{3|\cos \theta|}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} + \frac{|\cos \psi|}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} \right) \quad (3.57) \\
 &\leq \frac{2}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \frac{1}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3}.
 \end{aligned}$$

□

Χρησιμοποιώντας αυτά τα αποτελέσματα μπορούμε να αποδείξουμε την σύγκλιση σε δύο ΠΣΣ:



Σχήμα 3.7: Τα σημεία βάσης των αντίθετων μεταφορών της e_2 κατά $\pm ml\vec{v}$, απέχουν $\|ml\vec{v} + \vec{a}\|$ και $\|ml\vec{v} - \vec{a}\|$ από το σημείο βάσης της e_1 . Άρα $L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) \neq L(e_1, e_2 - ml\vec{v})$. Από το Λήμμα 3.3.4, $L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) + L(e_1, e_2 - ml\vec{v}) = L(e_1, e_2 + ml\vec{v}) - L(e_1, e_2 + ml\vec{v} - 2\vec{a})$.

Θεώρημα 3.3.7. *Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης μεταξύ δύο ελεύθερων αυσίδων σε ένα σύστημα με δύο ΠΣΣ συγκλίνει.*

Απόδειξη. Έστω $n_0 \in \mathbb{N}$ τέτοια ώστε $n_0 \gg \left(\frac{\|\vec{\alpha}\|}{l}\right)^2$. Τότε ο LK_P μπορεί να γραφτεί σαν:

$$\begin{aligned} LK_P(I, J) &= \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{n \leq n_0 \in \mathbb{N}} \sum_{\substack{\vec{v}, \|\vec{v}\|^2 = n \\ \gcd(v_1, v_2) = 1}} L(I_0, J_0 + ml(v_1, v_2, 0)) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{n > n_0 \in \mathbb{N}} \sum_{\substack{\vec{v}, \|\vec{v}\|^2 = n \\ \gcd(v_1, v_2) = 1}} (L(I_0, J_0 + ml(v_1, v_2, 0)) + L(I_0, J_0 - ml(v_1, v_2, 0))). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Συμβολίζουμε αυτά τα αθροίσματα σαν Σ_1, Σ_2 αντίστοιχα.

Για τους όρους στο Σ_2 το Λήμμα 3.3.6 μπορεί να εφαρμοστεί, δίνοντας

$$\begin{aligned} &\sum_{\substack{v_1, v_2 \\ \|\vec{v}\|^2 = n \gcd(v_1, v_2) = 1}} (L(I_0, J_0 + ml(v_1, v_2, 0)) + L(I_0, J_0 - ml(v_1, v_2, 0))) \\ &\leq \sum_{\substack{v_1, v_2 \\ \|\vec{v}\|^2 > n_0 \gcd(v_1, v_2) = 1}} \left(\frac{2}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \frac{1}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \frac{R_2(n)}{(ml\sqrt{n} - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} := Q_{m,n}^{(2)}, \end{aligned} \quad (3.59)$$

και, αφού $\|\vec{\alpha}\| < \frac{l}{2}$:

$$\begin{aligned} \Sigma_2 &< \frac{1}{2} \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{n > n_0} Q_{m,n}^{(2)} = \frac{1}{\pi} \frac{l}{2} \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{n > n_0} \frac{R_2(n)}{(ml\sqrt{n} - 3l/2)^3} \\ &< \frac{1}{2\pi l^2} \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{n > n_0} \frac{R_2(n)}{(m\sqrt{n} - 3/2)^3} \\ &< \frac{1}{2\pi l^2} \sum_{m \in \mathbb{N}} \frac{1}{m^3} \sum_{n > n_0} \frac{R_2(n)}{(\sqrt{n} - \frac{3}{2m})^3} < \frac{\zeta(3)}{2\pi l^2} \sum_{n > n_0} \frac{R_2(n)}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} < \infty, \end{aligned} \quad (3.60)$$

και η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη.

Για να αποδείξουμε ότι $\Sigma_1 < \infty$, $Q_{m,1}^{(1)}$ (Εξ. 3.47) ως εξής:

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= \sum_{m \in \mathbb{N}} \sum_{n \leq n_0} \sum_{\substack{\vec{v}, \|\vec{v}\|^2 = n \\ \gcd(v_1, v_2) = 1}} L(I_0, J_0 + m(v_1, v_2, 0)) \\ &< L(I_0, J_0) + \sum_{n \leq n_0} \sum_{\substack{\vec{v}, \|\vec{v}\|^2 = n \\ \gcd(v_1, v_2) = 1}} \sum_{m > 1} Q_{m,1}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Έστω $LK_P^{(1)}(I, J)$ ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης των I, J , σε μόνο μία ΠΣΣ. Τότε από την απόδειξη του Θεωρήματος 3.3.1, $\sum_{m>1} Q_{m,1} = LK_P^{(1)}(I, J) - \frac{1}{2}$, και άρα:

$$\Sigma_1 < \frac{1}{2} + \sum_{\substack{\vec{v}, \|\vec{v}\|^2 \leq n_0 \\ \gcd(v_1, v_2) = 1}} \left(LK_P^{(1)}(I, J) - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} + \left(LK_P^{(1)}(I, J) - \frac{1}{2} \right) \sum_{n \leq n_0} R_2(n) < \infty, \quad (3.62)$$

και από το Θεώρημα 3.3.1 η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη. Έχουμε αποδείξει ότι τα Σ_1, Σ_2 συγκλίνουν ομοιόμορφα και άρα ο LK_P συγκλίνει ομοιόμορφα, και είναι φραγμένος από πάνω από:

$$LK_P(I, J) < \frac{1}{2} + \left(\frac{2}{\pi(l-2b)^2} + \frac{\zeta(2)}{l^2} \right) \sum_{n \leq n_0} R_2(n) + \frac{\zeta(3)}{2\pi l^2} \sum_{n > n_0} \frac{R_2(n)}{(\sqrt{n} - 3/2)^3}. \quad (3.63)$$

□

Παρατήρηση 3.3.8. Χρησιμοποιώντας τις προσεγγίσεις $R_2(n) \approx \frac{6}{\pi}$, $\sum_{n \leq n_0} R_2(n) \approx \frac{6}{\pi} n_0$, ένα προσεγγιστικό άνω φράγμα του LK_P είναι:

$$LK_P(I, J) < \frac{1}{2} + \left(\frac{2}{\pi(l-2b)^2} + \frac{\zeta(2)}{l^2} \right) \frac{6}{\pi} n_0 + \frac{3\zeta(3)}{\pi^2 l^2} \sum_{n > n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3}. \quad (3.64)$$

Παρατηρούμε ότι για $l = 50, l = 1, n_0 = 10$, που είναι μεγέθη συγκρίσιμα με αυτά που χρησιμοποιούνται σε προσομοιώσεις τηγμάτων πολυαιθυλενίου, τότε για δύο ελεύθερες ακμές σε δύο ΠΣΣ η Εξ. 3.64 δίνει $LK_P(I, J) < 0.518115$.

Πόρισμα 3.3.9. Για δύο ανοικτές ελεύθερες αλυσίδες σε δύο ΠΣΣ, ο LK_P είναι μία συνεχής συνάρτηση στον χώρο των διαμορφώσεων σχεδόν παντού.

3.3.3 Σύγκλιση σε τρεις ΠΣΣ

Για να αποδείξουμε σύγκλιση του περιοδικού αριθμού περιέλιξης δύο ελεύθερων ακμών σε τρεις ΠΣΣ, η σύγκλιση του LK_P για έναν ειδικό τύπο διαμόρφωσης δύο ελεύθερων ακμών αποδεικνύεται πρώτα και στη συνέχεια χρησιμοποιείται για να γενικευθεί το αποτέλεσμα σε κάθε τυχαία διαμόρφωση δύο ελεύθερων ακμών.

3.3.3.1 Σύγκλιση για μία ειδική διαμόρφωση δύο ελεύθερων αλυσίδων

Έστω I', J' δύο ελεύθερες ακμές σε τρεις ΠΣΣ με πρωταρχικές εικόνες I'_0, J'_0 , των οποίων η παραμετρικοποίηση είναι $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$, $t, s \in [0, 1]$ αντίστοιχα, έτσι ώστε το $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ να είναι παράλληλο με τον x -άξονα, δηλαδή, $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2 = (\|\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2\|, 0, 0)$ (δείτε Εικόνα 3.8). Σε αυτή την παράγραφο αποδεικνύεται ότι ο $LK_P(I', J')$ συγκλίνει.

Θα χρησιμοποιήσουμε την παρακάτω έκφραση του LK_P . Για κάθε διάνυσμα $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$, βάζουμε μαζί όλα τα διανύσματα των οποίων οι συντεταγμένες είναι μεταθέσεις των συντεταγμένων του \vec{v} με όλους τους δυνατούς συνδυασμούς προσήμων. Για κάθε \vec{v} έστω $pm(\vec{v})$ η συλλογή αυτών των διανυσμάτων. Τότε ο $LK_P(I', J')$ μπορεί να εκφραστεί ως:

$$LK_P(I', J') = \sum_{v_1 < v_2 < v_3 \in \mathbb{N}} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} L(I'_0, J'_0 + \vec{u}) = \sum_{v_1 < v_2 < v_3 \in \mathbb{N}} G_{\vec{v}}(I'_0, J'_0), \quad (3.65)$$

όπου $G_{\vec{v}}(I'_0, J'_0) = \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} L(I'_0, J'_0 + \vec{u})$.

Αυτό μπορεί να εκφραστεί πιο συγκεκριμένα ως εξής: Έστω $\rho(\vec{v})$ ένα διάνυσμα των οποίων οι συντεταγμένες προέρχονται με έναν συνδυασμό προσήμων των συντεταγμένων του \vec{v} αφήνοντας την απόλυτη τιμή των συντεταγμένων σταθερή. Γι' ακάθε διάνυσμα υπάρχουν 8 τέτοιοι συνδυασμοί. Έστω $\rho_1(\vec{v}) = (v_1, v_2, v_3) = -\rho_5(\vec{v})$, $\rho_2(\vec{v}) = (v_1, v_2, -v_3) = -\rho_6(\vec{v})$, $\rho_3(\vec{v}) = (v_1, -v_2, v_3) = -\rho_7(\vec{v})$, $\rho_4(\vec{v}) = (v_1, -v_2, -v_3) = -\rho_8(\vec{v})$. Στη συνέχεια, έστω τ μία κυκλική μετάθεση της S_3 . Τότε για ένα διάνυσμα \vec{v} έστω $\tau_1(\vec{v}) = (v_1, v_2, v_3)$, $\tau_2(\vec{v}) = (v_2, v_3, v_1)$ και $\tau_3(\vec{v}) = (v_3, v_1, v_2)$. Έστω επίσης $\vec{z} = (v_1, v_3, v_2)$. Τότε ο LK_P μπορεί να εκφραστεί ως

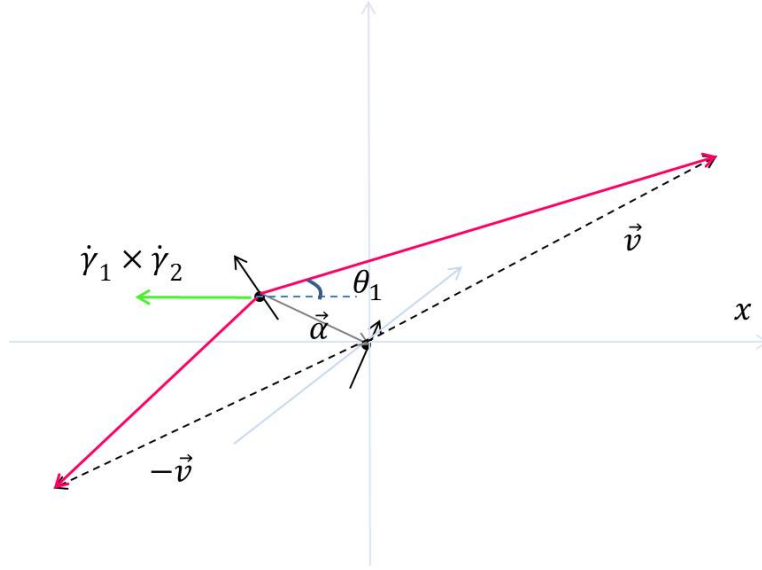
$$\begin{aligned} LK_P(I', J') &= \frac{1}{2} \sum_{v_1 < v_2 < v_3 \in \mathbb{Z}} \left(\sum_{j=1}^4 \sum_{i=1}^3 (L(I'_0, J'_0 + l\tau_i(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 - l\tau_i(\rho_j(\vec{v})))) \right) \\ &+ \sum_{j=1}^4 \sum_{i=1}^3 (L(I'_0, J'_0 + l\tau_i(\rho_j(\vec{z}))) + L(I'_0, J'_0 - l\tau_i(\rho_j(\vec{z})))) \quad (3.66) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{v_1 < v_2 < v_3 \in \mathbb{Z}} \left(\sum_{j=1}^4 \Sigma(\rho_j(\vec{v})) + \sum_{j=1}^4 \Sigma(\rho_j(\vec{z})) \right), \end{aligned}$$

όπου $\Sigma(\rho_j(\vec{v})) = \sum_{i=1}^3 (L(I'_0, J'_0 + l\tau_i(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 - l\tau_i(\rho_j(\vec{v}))))$ και

$\Sigma(\rho_j(\vec{z})) = \sum_{i=1}^3 (L(I'_0, J'_0 + l\tau_i(\rho_j(\vec{z}))) + L(I'_0, J'_0 - l\tau_i(\rho_j(\vec{z}))))$.

Άρα, $G_{\vec{v}}(I'_0, J'_0) = \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^4 \Sigma(\rho_j(\vec{v})) + \sum_{j=1}^4 \Sigma(\rho_j(\vec{z})) \right)$.

Τότε:



Σχήμα 3.8: Σε αυτή την διαμόρφωση το $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ είναι παράλληλο με τον x -άξονα. Έστω $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$, τότε για την γωνία θ_1 μεταξύ του $\vec{l}_i \times \vec{l}_j$ και του $\beta_j + \vec{\alpha} + \vec{v}$, έχουμε $\cos \theta_1 = \frac{v_1 + \alpha_1}{(v_1 + \alpha_1)^2 + (v_2 + \alpha_2)^2 + (v_3 + \alpha_3)^2}$.

Θεώρημα 3.3.10. Έστω I', J' δύο ελεύθερες ακμές με πρωταρχικές εικόνες I'_0, J'_0 με παραμετρικοποιήσεις $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ $t, s \in [0, 1]$ αντίστοιχα, έτσι ώστε $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2 = (\|\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2\|, 0, 0)$. Έστω ότι τα σημεία βάσης των I'_0, J'_0 ενώνονται με ένα διάνυσμα $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ και έστω $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$ ένα διάνυσμα τέτοιο ώστε $v_1, v_2, v_3 \gg \alpha = \max\{|\alpha_1|, |\alpha_2|, |\alpha_3|\}$. Τότε $G_{\vec{v}}(I'_0, J'_0) \approx 0$.

Απόδειξη. Στη συνέχεια θα αποδείξουμε ότι $\sum_{j=1}^4 \Sigma(\rho_j(\vec{v})) \approx 0$. Όμοια, μπορεί να αποδειχθεί ότι $\sum_{j=1}^4 \Sigma(\rho_j(\vec{z})) \approx 0$, άρα $G_{\vec{v}}(I', J') \approx 0$.

Παρατηρούμε ότι το $\Sigma(\rho_j(\vec{v}))$ ισούται με

$$\begin{aligned} \Sigma(\rho_j(\vec{v})) = & L(I'_0, J'_0 + \tau_1(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 - \tau_1(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 + \tau_2(\rho_j(\vec{v}))) \\ & + L(I'_0, J'_0 - \tau_2(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 + \tau_3(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 - \tau_3(\rho_j(\vec{v}))), \end{aligned} \quad (3.67)$$

όπου το άθροισμα των αντίθετων μεταφορών μπορεί να εκφραστεί ως:

$$\begin{aligned}
 & L(I'_0, J'_0 + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \int \int \left(\text{sign}(L(I'_0, J'_0 + \tau_i(\rho_j(\vec{v})))) \frac{|\cos \theta_{ij}^+(t, s) \sin \phi|}{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s) + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))\|^2} \right. \\
 & \left. + \text{sign}(L(I'_0, J'_0 - \tau_i(\rho_j(\vec{v})))) \frac{|\cos \theta_{ij}^-(t, s) \sin \phi|}{\|\gamma_1(t) - \gamma_2(s) - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))\|^2} \right) ds dt, \tag{3.68}
 \end{aligned}$$

όπου $\theta_{ij}^+(t, s)$ είναι η μικρότερη γωνία μεταξύ των $\gamma_1(t) - \gamma_2(s) + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))$ και $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$, και παρόμοια $\theta_{ij}^-(t, s)$ είναι η μικρότερη γωνία μεταξύ των $\gamma_1(t) - \gamma_2(s) - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))$ και $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ και ϕ είναι η γωνία μεταξύ των I_0, J_0 .

Έστω $\tau_i(\rho_j(\vec{v})) = (w_x, w_y, w_z)$, τότε $L(I_0, J_0 + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) > 0$ αν και μόνο αν $(w_x - a_1)a_1 > 0$, δηλαδή, εάν τα a_1 και $w_x - a_1$ έχουν το ίδιο πρόσημο. Τότε $L(I_0, J_0 - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) < 0$, δηλαδή, οι αντίθετες μεταφορές του J'_0 έχουν αντίθετο πρόσημο αριθμού περιέλιξης με το I'_0 . Αφού $v_1, v_2, v_3 > \alpha$, $L(I_0, J_0 + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) > 0$ και $L(I_0, J_0 - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) < 0$ για κάθε i, j .

Επίσης, για $\|\vec{v}\| \gg \|\vec{\alpha}\|$ η τιμή των όρων μέσα στο ολοκλήρωμα στην Εξ. 3.68 για κάθε s, t μπορεί να προσεγγιστεί από την τιμή για (s_1, t_1) έτσι ώστε $\gamma_1(t_1)$ είναι το σημείο βάσης του I_0 και $\gamma_2(s_1)$ είναι το σημείο βάσης του J_0 . Άρα, για $v_1, v_2, v_3 \gg \alpha$:

$$\begin{aligned}
 & L(I'_0, J'_0 + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) + L(I'_0, J'_0 - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))) \\
 & \approx \frac{1}{4\pi} \sin \phi \\
 & \left(\int \int \left(\frac{|\cos \theta_{ij}^+(t_1, s_1)|}{\|\gamma_1(t_1) - \gamma_2(s_1) + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{ij}^-(t_1, s_1)|}{\|\gamma_1(t_1) - \gamma_2(s_1) - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))\|^2} \right) ds dt \right) \tag{3.69} \\
 &= \frac{1}{4\pi} \sin \phi \left(\frac{|\cos \theta_{ij}^+|}{\|\vec{\alpha} + \tau_i(\rho_j(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{ij}^-|}{\|\vec{\alpha} - \tau_i(\rho_j(\vec{v}))\|^2} \right).
 \end{aligned}$$

Άρα:

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\rho_j(\vec{v})) & \approx \frac{1}{4\pi} \left[\left(\frac{|\cos \theta_{1j}^+|}{\|\vec{\alpha} + \tau_1(\rho_j(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{1j}^-|}{\|\vec{\alpha} - \tau_1(\rho_j(\vec{v}))\|^2} \right) \right. \\
 & \left. + \left(\frac{|\cos \theta_{2j}^+|}{\|\vec{\alpha} + \tau_2(\rho_j(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{2j}^-|}{\|\vec{\alpha} - \tau_2(\rho_j(\vec{v}))\|^2} \right) \right. \\
 & \left. + \left(\frac{|\cos \theta_{3j}^+|}{\|\vec{\alpha} + \tau_3(\rho_j(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{3j}^-|}{\|\vec{\alpha} - \tau_3(\rho_j(\vec{v}))\|^2} \right) \right]. \tag{3.70}
 \end{aligned}$$

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, έστω ότι $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 > 0$, τότε (δείτε Εικόνα 3.8)

$$|\cos \theta_{11}^+(t_1, s_1)| = \frac{v_1 + \alpha_1}{\|\vec{\alpha} + \vec{v}\|} = \frac{v_1 + \alpha_1}{\sqrt{(v_1 + \alpha_1)^2 + (v_2 + \alpha_2)^2 + (v_3 + \alpha_3)^2}}, \quad (3.71)$$

και

$$|\cos \theta_{11}^-(t_1, s_1)| = \frac{v_1 - \alpha_1}{\|\vec{\alpha} - \vec{v}\|} = \frac{v_1 - \alpha_1}{\sqrt{(v_1 - \alpha_1)^2 + (v_2 - \alpha_2)^2 + (v_3 - \alpha_3)^2}}. \quad (3.72)$$

Άρα η Εξ.3.70 μπορεί να γραφτεί σαν:

$$\begin{aligned} \Sigma(\rho_1(\vec{v})) &= \frac{1}{4\pi} \\ &\left(\frac{v_1 + \alpha_1}{((v_1 + \alpha_1)^2 + (v_2 + \alpha_2)^2 + (v_3 + \alpha_3)^2)^{3/2}} - \frac{v_1 - \alpha_1}{((v_1 - \alpha_1)^2 + (v_2 - \alpha_2)^2 + (v_3 - \alpha_3)^2)^{3/2}} \right. \\ &+ \frac{v_2 + \alpha_1}{((v_2 + \alpha_1)^2 + (v_1 + \alpha_2)^2 + (v_3 + \alpha_3)^2)^{3/2}} - \frac{v_2 - \alpha_1}{((v_2 - \alpha_1)^2 + (v_1 - \alpha_2)^2 + (v_3 - \alpha_3)^2)^{3/2}} \\ &\left. + \frac{v_3 + \alpha_1}{((v_3 + \alpha_1)^2 + (v_2 + \alpha_2)^2 + (v_1 + \alpha_3)^2)^{3/2}} - \frac{v_3 - \alpha_1}{((v_3 - \alpha_1)^2 + (v_2 - \alpha_2)^2 + (v_1 - \alpha_3)^2)^{3/2}} \right). \end{aligned} \quad (3.73)$$

Έστω $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ όπου $f(x, y, z) = -\frac{1}{\|(x, y, z)\|}$. Τότε οι πρώτοι δύο όροι στην Εξ. 3.73 μπορούν να γραφτούν σαν $\frac{\partial f}{\partial x}(v_1 + \alpha_1, v_2 + \alpha_2, v_3 + \alpha_3) - \frac{\partial f}{\partial x}(v_1 - \alpha_1, v_2 - \alpha_2, v_3 - \alpha_3)$. Τότε για $v_1, v_2, v_3 \gg \alpha$, αυτό μπορεί να προσεγγιστεί από την παράγωγο της $\frac{\partial f}{\partial x}$ κατά την κατεύθυνση $\vec{\alpha}$ εφαρμόζοντας το Θεώρημα Μέσης Τιμής του Απειροστικού Λογισμού:

$$\begin{aligned} &\frac{v_1 + \alpha_1}{((v_1 + \alpha_1)^2 + (v_2 + \alpha_2)^2 + (v_3 + \alpha_3)^2)^{3/2}} \\ &- \frac{v_1 - \alpha_1}{((v_1 - \alpha_1)^2 + (v_2 - \alpha_2)^2 + (v_3 - \alpha_3)^2)^{3/2}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial x}(v_1 + \alpha_1, v_2 + \alpha_2, v_3 + \alpha_3) - \frac{\partial f}{\partial x}(v_1 - \alpha_1, v_2 - \alpha_2, v_3 - \alpha_3) \\ &\approx 2\|\vec{\alpha}\| \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) (v_1, v_2, v_3) \cdot \vec{\alpha}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Ακολουθώντας το ίδιο σκεπτικό για τα επόμενα ζεύγη όρων στην Εξ. 3.73, για $v_1, v_2, v_3 \gg \alpha$ η Εξ. 3.73 μπορεί να προσεγγιστεί με:

$$\begin{aligned} \Sigma(\rho_1(\vec{v})) &\approx \frac{1}{4\pi} 2|\alpha| \\ &\left(\nabla \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_3, \alpha_1, \alpha_2) + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_2, \alpha_3, \alpha_1) \right). \end{aligned} \quad (3.75)$$

Ακολουθώντας την ίδια μέθοδο, το $\Sigma(\rho_2(\vec{v}))$ μπορεί να προσεγγιστεί με:

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\rho_2(\vec{v})) &= \frac{1}{4\pi} \left(\frac{|\cos \theta_{21}^+|}{\|\vec{\alpha} + \tau_1(\rho_2(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{21}^-|}{\|\vec{\alpha} - \tau_1(\rho_2(\vec{v}))\|^2} \right. \\
 &+ \frac{|\cos \theta_{22}^+|}{\|\vec{\alpha} + \tau_2(\rho_2(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{22}^-|}{\|\vec{\alpha} - \tau_2(\rho_2(\vec{v}))\|^2} + \frac{|\cos \theta_{23}^+|}{\|\vec{\alpha} + \tau_3(\rho_2(\vec{v}))\|^2} - \frac{|\cos \theta_{23}^-|}{\|\vec{\alpha} - \tau_3(\rho_2(\vec{v}))\|^2} \Big) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \\
 &\left(\frac{v_1 + \alpha_1}{((v_1 + \alpha_1)^2 + (v_2 + \alpha_2)^2 + (-v_3 + \alpha_3)^2)^{3/2}} - \frac{v_1 - \alpha_1}{((v_1 - \alpha_1)^2 + (v_2 - \alpha_2)^2 + (-v_3 - \alpha_3)^2)^{3/2}} \right. \\
 &+ \frac{v_2 + \alpha_1}{((v_2 + \alpha_1)^2 + (-v_3 + \alpha_2)^2 + (v_1 + \alpha_3)^2)^{3/2}} - \frac{v_2 - \alpha_1}{((v_2 - \alpha_1)^2 + (-v_3 - \alpha_2)^2 + (v_1 - \alpha_3)^2)^{3/2}} \\
 &+ \frac{v_3 + \alpha_1}{((v_3 + \alpha_1)^2 + (-v_1 + \alpha_2)^2 + (-v_2 + \alpha_3)^2)^{3/2}} \\
 &\left. - \frac{v_3 - \alpha_1}{((v_3 - \alpha_1)^2 + (-v_1 - \alpha_2)^2 + (-v_2 - \alpha_3)^2)^{3/2}} \right) \\
 &\approx \frac{1}{2\pi} |\alpha| \\
 &\left(\nabla \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_1, \alpha_2, -\alpha_3) + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_3, \alpha_1, -\alpha_2) \right. \\
 &\left. + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right) (\vec{v}) \cdot (-\alpha_2, -\alpha_3, \alpha_1) \right).
 \end{aligned} \tag{3.76}$$

Ομοίως:

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\rho_3(\vec{v})) &\approx -\frac{|\alpha|^2}{2\pi} \\
 &\left(\nabla \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_1, -\alpha_2, \alpha_3) + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) (\vec{v}) \cdot (-\alpha_3, \alpha_1, -\alpha_2) \right. \\
 &\left. + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_2, -\alpha_3, \alpha_1) \right),
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

και

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\rho_4(\vec{v})) &\approx -\frac{|\alpha|^2}{2\pi} \\
 &\left(\nabla \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) (\vec{v}) \cdot (\alpha_1, -\alpha_2, -\alpha_3) + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) (\vec{v}) \cdot (-\alpha_3, \alpha_1, \alpha_2) \right. \\
 &\left. + \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right) (\vec{v}) \cdot (-\alpha_2, \alpha_3, \alpha_1) \right).
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

Τελικά αθροίζοντας τις Εξ. 3.75, 3.76, 3.77 και 3.78:

$$\sum_{j=1}^4 \Sigma(\rho_j(\vec{v})) \approx -2 \frac{|\alpha|^2}{2\pi} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\vec{v}) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(\vec{v}) + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(\vec{v}) \right) = -\frac{|\alpha|^2}{\pi} \nabla^2 f = 0. \quad (3.79)$$

Ομοίως, $\sum_{\vec{e}' \in p^{(1)}(\vec{v})} \Sigma(\vec{e}') \approx 0$, άρα $G_{\vec{v}}(I'_0, J'_0) \approx 0$. \square

Παρατήρηση 3.3.11. Παρατηρείστε ότι η συνάρτηση $f(x, y, z) = -\frac{1}{\|(x, y, z)\|}$ είναι η αντίθετη του ηλεκτρικού δυναμικού που δημιουργείται από ένα σημείο σε απόσταση $\|(x, y, z)\|$.

Τώρα μπορούμε να αποδείξουμε το παρακάτω:

Λήμμα 3.3.12. Έστω I', J' δύο ελεύθερες ακμές με πρωταρχικές ακμές I'_0, J'_0 με παραμετρικοποιήσεις $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ $t, s \in [0, 1]$ αντίστοιχα, έτσι ώστε $\gamma_1 \times \gamma_2 = (\|\gamma_1 \times \gamma_2\|, 0, 0)$. Τότε $LK_P(I', J') < \infty$.

Απόδειξη. Έστω $n_0 \in \mathbb{N}$ τέτοια ώστε $n_0 \gg \left(\frac{\|\vec{\alpha}\|}{l}\right)^2$. Έστω V το σύνολο των διανυσμάτων $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3) \in \mathbb{Z}^3$, με $v_1, v_2, v_3 > \sqrt{n_0}$. Τότε ο LK_P μπορεί να εκφραστεί ως

$$LK_P(I', J') = \sum_{\vec{v} \in V} L(I'_0, J'_0 + \vec{v}) + \sum_{\vec{v} \notin V} L(I'_0, J'_0 + \vec{v}). \quad (3.80)$$

Από το Λήμμα 3.3.10 αυτό μπορεί να εκφραστεί ως

$$LK_P(I', J') \approx \sum_{\vec{v} \notin V} L(I'_0, J'_0 + \vec{v}). \quad (3.81)$$

Παρατηρούμε ότι οι όροι που δεν ανήκουν στο V αντιστοιχούν στα σημεία πλέγματος στις περιοχές

$$A = \{-\sqrt{n_0} \leq x, y \leq \sqrt{n_0}\}, B = \{-\sqrt{n_0} \leq x, z \leq \sqrt{n_0}\} \text{ και } C = \{-\sqrt{n_0} \leq y, z \leq \sqrt{n_0}\}.$$

Έστω $LK_P^{(2)}(I', J')$ ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης των I', J' σε μόνο δύο ΠΣΣ. Αυτό ισούται με το άθροισμα των όρων στην Εξ. 3.81 που αντιστοιχούν σε σημεία πλέγματος στο xy -, ή το xz -, ή το yz -επίπεδο. Άρα το άθροισμα των όρων που αντιστοιχούν σε σημεία πλέγματος στο A είναι φραγμένα από πάνω από το $2\sqrt{n_0}LK_P^{(2)}(I', J')$, αφού υπάρχουν $2\sqrt{n_0}$ επίπεδα στα οποία κείτονται σημεία πλέγματος. Άρα, οι όροι που αντιστοιχούν στα διανύσματα στο $A \cup B \cup C$ φράσσονται από πάνω από το $6\sqrt{n_0}LK_P^{(2)}(I', J')$.

$$\begin{aligned} LK_P(I', J') &< \sum_{\vec{v} \in A} L(I'_0, J'_0 + \vec{v}) + \sum_{\vec{v} \in B} L(I'_0, J'_0 + \vec{v}) + \sum_{\vec{v} \in C} L(I'_0, J'_0 + \vec{v}) \\ &< 6\sqrt{n_0}LK_P^{(2)}(I', J'). \end{aligned} \quad (3.82)$$

Αφού ο $LK_P^{(2)}(I', J')$ συγκλίνει ομοιόμορφα (Θεώρημα 3.3.7), ο $LK_P(I', J')$ συγκλίνει ομοιόμορφα. □

Παρατηρείστε ότι στην παραπάνω απόδειξη ενός πεπερασμένου άνω φράγματος του $LK_P(I', J')$, κάποιιοι όροι προσμετρώνται πολλαπλές φορές. Η παρακάτω απόδειξη δίνει ένα πιο χαμηλό άνω φράγμα του $LK_P(I', J')$:

Εναλλακτική απόδειξη του Λήμματος 3.3.12.

$$\begin{aligned} LK_P(I', J') &= \sum_{v_1 \leq v_2 \leq v_3 \in \mathbb{N}} G_{\vec{v}}(I', J') \\ &= \sum_{\sqrt{n_0} < v_1 \leq v_2 \leq v_3} G_{\vec{v}}(I', J') + \sum_{v_1 \leq \sqrt{n_0} < v_2 \leq v_3} G_{\vec{v}}(I', J') \\ &+ \sum_{v_1 \leq v_2 \leq \sqrt{n_0} < v_3} G_{\vec{v}}(I', J') + \sum_{v_1 \leq v_2 \leq v_3 \leq \sqrt{n_0}} G_{\vec{v}}(I', J'). \end{aligned} \quad (3.83)$$

Παρατηρείστε ότι από το Λήμμα 3.3.10

$$\begin{aligned} LK_P(I', J') &\approx \sum_{v_1 \leq \sqrt{n_0} < v_2 \leq v_3} G_{\vec{v}}(I', J') + \sum_{v_1 \leq v_2 \leq \sqrt{n_0} < v_3} G_{\vec{v}}(I', J') \\ &+ \sum_{v_1 \leq v_2 \leq v_3 \leq \sqrt{n_0}} G_{\vec{v}}(I', J'), \end{aligned} \quad (3.84)$$

όπου $G_{\vec{v}} = \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} L(I'_0, J'_0 + l\vec{u})$. Ας συμβολίσουμε αυτούς τους όρους U_1, U_2, U_3 αντίστοιχα.

Παρατηρείστε ότι οι όροι στο δεύτερο και τον τρίτο όρο, U_1, U_2 , είναι τέτοιοι ώστε το Λήμμα 3.3.6 μπορεί να εφαρμοστεί. Άρα:

$$\begin{aligned} U_1 &< \left| \sum_{v_1 \leq \sqrt{n_0} < v_2 \leq v_3} G_{m\vec{v}}(I', J') \right| \\ &< \frac{1}{2} \sum_{v_1 \leq \sqrt{n_0} < v_2 \leq v_3} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} |L(I'_0, J'_0 + l\vec{u}) + L(I'_0, J'_0 - l\vec{u})| \\ &< \frac{1}{2} \sum_{v_1 \leq \sqrt{n_0} < v_2 \leq v_3} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} \frac{2}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \frac{1}{(|l|\|\vec{u}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} \\ &= \frac{48}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \sum_{v_1 \leq \sqrt{n_0} < v_2 < v_3} \frac{1}{(|l|\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} < \frac{48}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \sqrt{n_0} \sum_{\substack{\sqrt{n_0} < v_2, v_3 \\ v_1=0}} \frac{1}{(|l|\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} \\ &< \frac{24}{\pi l^2} \sqrt{n_0} \sum_{n > 2n_0} \sum_{\substack{\sqrt{n_0} < v_2, v_3 \\ v_1=0}} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} < \frac{24}{\pi l^2} \sqrt{n_0} \sum_{n > 2n_0} \frac{r_2(n)}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} < \infty. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Ομοίως,

$$\begin{aligned}
U_2 &< \frac{1}{2} \sum_{v_1 < v_2 \leq \sqrt{n_0} < v_3} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} |L(I'_0, J'_0 + l\vec{u}) + L(I'_0, J'_0 - l\vec{u})| \\
&< \frac{1}{2} \sum_{v_1 \leq v_2 \leq \sqrt{n_0} < v_3} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} |L(I'_0, J'_0 + l\vec{u}) + L(I'_0, J'_0 - l\vec{u})| \\
&< \frac{1}{2} \sum_m \sum_{v_1 \leq v_2 \leq \sqrt{n_0} < v_3} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} \frac{2}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \frac{1}{(l\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} \\
&< \frac{48}{\pi} \|\vec{\alpha}\| \sum_{v_1 \leq v_2 \leq \sqrt{n_0} < v_3} \frac{1}{(l\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} \\
&< \frac{48}{\pi} \|\vec{\alpha}\| (\sqrt{n_0} - 1) \frac{\sqrt{n_0}}{2} \sum_{\substack{\sqrt{n_0} < v_3 \\ v_1 = v_2 = 0}} \frac{1}{(l\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^3} \\
&< \frac{12}{\pi l^2} (\sqrt{n_0} - 1) \sqrt{n_0} \sum_{n > n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} < \infty.
\end{aligned} \tag{3.86}$$

Για τους όρους στο U_3 , εφαρμόζοντας το Λήμμα 3.2.15 έχουμε:

$$\begin{aligned}
U_3 &= \sum_{v_1 \leq v_2 \leq v_3 \leq \sqrt{n_0}} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} |L(I'_0, J'_0 + l\vec{u})| \\
&< \frac{1}{4\pi} \sum_{v_1 \leq v_2 \leq v_3 \leq \sqrt{n_0}} \sum_{\vec{u} \in pm(\vec{v})} \frac{1}{(l\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} \\
&< \frac{12}{\pi} \sum_{v_1 \leq v_2 \leq v_3 \leq \sqrt{n_0}} \frac{1}{(l\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} \\
&< \frac{12}{\pi} \left(\frac{4}{(l - 2b)^2} + \sum_{2 \leq n < 3n_0} \frac{r_3(n)}{((\sqrt{n} - 1)^2 l^2)} \right).
\end{aligned} \tag{3.87}$$

Άρα ο $LK_P(I', J') \approx U_1 + U_2 + U_3 < \infty$ συγκλίνει ομοιόμορφα και είναι φραγμένος από πάνω από το:

$$\begin{aligned}
LK_P(I', J') &< \frac{1}{2} + \frac{24}{\pi l^2} \sqrt{n_0} \sum_{n > n_0} r_2(n) \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} + \frac{12}{\pi l^2} (\sqrt{n_0} - 1) \sqrt{n_0} \sum_{n > n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} \\
&+ \frac{12}{\pi} \left(\frac{4}{(l - 2b)^2} + \sum_{2 \leq n < 3n_0} \frac{r_3(n)}{((\sqrt{n} - 1)^2 l^2)} \right).
\end{aligned} \tag{3.88}$$

□

Παρατήρηση 3.3.13. Χρησιμοποιώντας τις προσεγγίσεις $r_2(n) \approx \pi, r_3(n) \approx \frac{4\pi}{3}\sqrt{n}$, έχουμε το παρακάτω άνω φράγμα:

$$LK_P(I', J') < \frac{1}{2} + \frac{24}{l^2} \sqrt{n_0} \sum_{n>n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} + \frac{12}{\pi l^2} (\sqrt{n_0} - 1) \sqrt{n_0} \sum_{n>n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} + \frac{12}{\pi} \left(\frac{4}{(l - 2b)^2} + \frac{4\pi}{3} \sum_{2 \leq n < 3n_0} \frac{\sqrt{n}}{((\sqrt{n} - 1)^2 l^2)} \right). \quad (3.89)$$

Παρατηρείστε ότι για $l = 50, l = 1, n_0 = 10$, που είναι μέγεθθ συγκρίσιμα με αυτά που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση πολυμερικών τηγμάτων, για δύο ακμές σε τρεις ΠΣΣ, τέτοιες ώστε το $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ είναι παράλληλο με τον x -άξονα, Εξ. 3.89 δίνει $LK_P(I', J') < 0.5109166$.

3.3.3.2 Σύγκλιση για κάθε διαμόρφωση δύο ελεύθερων αλυσίδων

Έστω Ω ο χώρος όλων των δυνατών διαμορφώσεων δύο γεννητόρων ακμών σε ένα κελί. Έστω I, J δύο ελεύθερες ακμές με πρωταρχικές εικόνες I_0, J_0 . Αυτές αντιστοιχούν σε ένα σημείο, έστω \vec{x}_1 , στον Ω . Με στροφές και μεταφορές οι I, J μπορούν να μεταλλαχθούν σε δύο ελεύθερες ακμές I', J' με πρωταρχικές εικόνες I'_0, J'_0 με παραμετρικοποιήσεις $\gamma_1(t), \gamma_2(s), t, s \in [0, 1]$ αντίστοιχα, έτσι ώστε $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2 = (\|\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2\|, 0, 0)$. Τότε οι ελεύθερες ακμές I', J' αντιστοιχούν σε ένα σημείο, έστω \vec{x}_1 , στον Ω . Αυτή η μετάλλξη μπορεί να περιγραφεί με ένα μονοπάτι $\vec{r}(\tau)$ στον Ω από το $\vec{r}(0) = \vec{x}_0$ στο $\vec{r}(1) = \vec{x}_1$, έτσι ώστε σε κάθε τ αντιστοιχούν δύο ελεύθερες ακμές $I(\tau), J(\tau)$. Τότε ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης μπορεί να εκφραστεί ως

$$LK_P(\vec{r}(\tau)) = LK_P(I(\tau), J(\tau)) = \sum_v L(I_0(\tau), J_0(\tau) + \vec{v}). \quad (3.90)$$

Παρατηρείστε ότι κάθε όρος, $L(I_0(\tau), J_0(\tau) + \vec{v})$, μπορεί να αλλάξει με το τ , αφού οι θέσεις των $I_0(\tau), J_0(\tau)$ αλλάζουν. Έστω $\gamma_1(t, \tau), \gamma_2(s, \tau), t, s \in [0, 1]$, οι παραμετρικοποιήσεις των $I_0(\tau), J_0(\tau)$ αντίστοιχα. Έστω επίσης $\vec{a}(\tau)$ το δάνυσμα που ενώνει το σημείο βάσης του $J_0(\tau)$ σε αυτό του $I_0(\tau)$. Στη συνέχεια, έστω $\phi(\tau)$ η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1(\tau)$ και $\dot{\gamma}_2(\tau)$, και έστω $\psi(\tau)$ η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1(\tau) \times \dot{\gamma}_2(\tau)$ και $\vec{a}(\tau)$.

Υπάρχει ένα ειδικό μονοπάτι από το x_0 στο x_1 όπου οι θέσεις των $I_0(\tau), J_0(\tau)$ αλλάζουν αλλά η σχετική θέση των $I_0(\tau), J_0(\tau)$ παραμένει η ίδια. Τότε ο $L(I_0(\tau), J_0(\tau))$ παραμένει σταθερός, αλλά κάθε άλλος όρος $L(I_0(\tau), J_0(\tau) + ml\vec{v})$ αλλάζει, αφού οι σχετικές θέσεις των $I_0(\tau), J_0(\tau) + ml\vec{v}$ αλλάζουν. Αυτό συμβαίνει περιστρέφοντας το \vec{a} κρατώντας τις σχετικές θέσεις των ακμών ως προς το \vec{a} σταθερό. Τότε η σχετική θέση των $\dot{\gamma}_1(\tau) \times \dot{\gamma}_2(\tau)$ με το $\vec{a}(\tau)$ μένει σταθερή. Αρα καθώς το \vec{a} περιστρέφεται, το ίδιο κάνει το $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$, άρα, με αυτόν τον τρόπο καταλήγουμε σε μία διαμόρφωση τέτοια ώστε $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2 = (\|\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2\|, 0, 0)$. Αυτή η διαδικασία

μπορεί να περιγραφεί από ένα μονοπάτι στον Ω για τον οποίο $\phi(\tau), \psi(\tau), \|\vec{\alpha}(\tau)\|$ είναι σταθερά. Στην συνέχεια, θα αποδειχθεί ότι για ένα τέτοιο μονοπάτι η παράγωγος του LKP συγκλίνει και από αυτό έπεται η απόδειξη της σύγκλισης του LKP για μία τυχαία διαμόρφωση.

Για την απόδειξη, θα χρειαστούμε το παρακάτω Λήμμα:

Λήμμα 3.3.14. Έστω \vec{r} ένα μονοπάτι με παραμετρικοποίηση $\vec{r}(\tau), \tau \in [0, 1]$ στον χώρο των διαμορφώσεων τέτοιο ώστε τα $\phi(\tau), \psi(\tau), \|\vec{\alpha}(\tau)\|$ είναι σταθερά. Τότε για $\|\vec{v}\| > \sqrt{n_0} \gg \frac{\|\vec{\alpha}\|}{l}$

$$\frac{d}{d\tau} \left(L(I_0(\tau), J_0(\tau) + ml\vec{v}) + L(I_0(\tau), J_0(\tau) - ml\vec{v}) \right) \leq \frac{21}{2\pi} \frac{\|\vec{\alpha}\|^2}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^4}. \quad (3.91)$$

Απόδειξη. Παρατηρείστε ότι για $\|\vec{v}\| > \sqrt{n_0}$ ο όρος μέσα στο ολοκλήρωμα στο $L(I_0(\tau), J_0(\tau) + ml\vec{v})$, για κάθε $s, t \in [0, 1]$, μπορεί να προσεγγιστεί από την τιμή του στο (τ, s_1, t_1) τέτοιο ώστε το $\gamma_1(\tau, t_1)$ είναι το σημείο βάσης του $I_0(\tau)$, έστω β_i , και $\gamma_2(\tau, s_1)$ είναι το σημείο βάσης του $J_0(\tau)$, έστω β_j . Έστω $\theta(\tau)$ η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1(\tau) \times \dot{\gamma}_2(\tau)$ και $\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}$. Τότε για $\|\vec{v}\| > \sqrt{n_0}$ (δείτε απόδειξη Λήμματος 3.3.6):

$$\begin{aligned} L(I_0(\tau), J_0(\tau) + ml\vec{v}) + L(I_0(\tau), J_0(\tau) - ml\vec{v}) \\ \approx \frac{\sin \phi}{4\pi} \left(\frac{-6\|\vec{\alpha}(\tau)\| \cos \theta(\tau)}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^3} + \frac{2\|\vec{\alpha}(\tau)\| \cos \psi(\tau)}{\|ml\vec{v} + 3\vec{\alpha}(\tau)\|^3} \right). \end{aligned} \quad (3.92)$$

Αφού τα $\|\vec{\alpha}(\tau)\|, \phi(\tau), \psi(\tau)$ είναι σταθερά:

$$\begin{aligned} & \left| \frac{d}{d\tau} \left(L(I_0(\tau), J_0(\tau) + ml\vec{v}) + L(I_0(\tau), J_0(\tau) - ml\vec{v}) \right) \right| \\ & \approx \frac{1}{2\pi} \|\vec{\alpha}\| |\sin \phi| \left| \frac{d}{d\tau} \left(\frac{-3 \cos \theta(\tau)}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^3} \right) + \cos \psi \frac{d}{d\tau} \left(\frac{1}{\|ml\vec{v} + 3\vec{\alpha}(\tau)\|^3} \right) \right| \\ & = \frac{1}{2\pi} \|\vec{\alpha}\| |\sin \phi| \left| \frac{-3 \sin \theta(\tau) d\theta/d\tau}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^3} + 9 \cos \theta(\tau) \frac{(\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}) \cdot \vec{\alpha}'(\tau)}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^5} \right. \\ & \quad \left. - 9 \cos \psi \frac{(ml\vec{v} + 3\vec{\alpha}(\tau)) \cdot \vec{\alpha}'}{\|ml\vec{v} + 3\vec{\alpha}(\tau)\|^5} \right| \quad (3.93) \\ & \leq \frac{1}{2\pi} \|\vec{\alpha}\| |\sin \phi| \left(\frac{3|\sin \theta(\tau)| |d\theta/d\tau|}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^3} + \frac{9|\cos \theta(\tau)| \|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^4} + \frac{9|\cos \psi| \|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{\|ml\vec{v} + 3\vec{\alpha}(\tau)\|^4} \right) \\ & \leq \frac{1}{2\pi} \|\vec{\alpha}\| \left(\frac{3|d\theta/d\tau|}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^3} + \frac{9\|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{\|\vec{\alpha}(\tau) + ml\vec{v}\|^4} + \frac{9\|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{\|ml\vec{v} + 3\vec{\alpha}(\tau)\|^4} \right) \\ & \leq \frac{1}{2\pi} \|\vec{\alpha}\| \left(\frac{3|d\theta/d\tau|}{(ml\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}(\tau)\|)^3} + \frac{18\|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}(\tau)\|)^4} \right). \end{aligned}$$

Από την προσέγγιση μικρής γωνίας, $d\theta \approx \sin d\theta$. Αυτό μπορεί να προσεγγιστεί από $\sin d\theta \approx \frac{l_{arc}}{\|\vec{\alpha} + ml\vec{v}\|}$, όπου l_{arc} είναι το μήκος του τόξου που διαγράφει το β_i στο διάστημα $\tau, \tau + d\tau$. Αυτό

είναι ένα τόξο στον κύκλο ακτίνας $\|\vec{\alpha}\|$ με κέντρο το β_j . Έστω θ_0 η γωνία περιστροφής του $\vec{\alpha}$. Τότε $l_{arc} \approx \|\vec{\alpha}\|d\theta_0$, άρα $\sin d\theta \approx \frac{\|\vec{\alpha}\|d\theta_0}{\alpha+m\vec{v}}$ (δείτε Εικόνα 3.9). Επίσης, $\|\vec{\alpha}'(\tau)\| < \|\vec{\alpha}\|d\theta_0/d\tau$. Άρα,

$$\begin{aligned}
 & \left| \frac{d}{d\tau} \left(L(I_0(\tau), J_0(\tau) + ml\vec{v}) + L(I_0(\tau), J_0(\tau) - ml\vec{v}) \right) \right| \\
 & \leq \frac{1}{2\pi} \|\vec{\alpha}\| \left(\frac{3\|\vec{\alpha}\| |d\theta_0/d\tau|}{(ml\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}(\tau)\|)^4} + \frac{18\|\vec{\alpha}\| |d\theta_0/d\tau|}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}(\tau)\|)^4} \right) \\
 & \leq \frac{3}{2\pi} \|\vec{\alpha}\|^2 |d\theta_0/d\tau| \left(\frac{1}{(ml\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}(\tau)\|)^4} + \frac{6}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}(\tau)\|)^4} \right) \\
 & \leq \frac{21}{2\pi} \frac{\|\vec{\alpha}\|^2}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^4}.
 \end{aligned} \tag{3.94}$$

□

Θεώρημα 3.3.15. Έστω \vec{r} ένα μονοπάτι με παραμετρικοποίηση $\vec{r}(\tau), \tau \in [0, 1]$ στον χώρο των διαμορφώσεων έτσι ώστε τα $\phi(\tau), \psi(\tau), \|\vec{\alpha}(\tau)\|$ είναι σταθερά. Τότε $\nabla LK_P(\vec{r}(\tau)) \cdot \vec{r}'(\tau) < \infty$.

Απόδειξη. Έστω $\Phi : \tau \rightarrow LK_P(\vec{r}(\tau))$, τότε

$$\nabla LK_P(\vec{r}(\tau)) \cdot \vec{r}'(\tau) = \Phi'(\tau). \tag{3.95}$$

Έστω

$$\mathcal{L}_{m\vec{v}} : \tau \rightarrow L(l_1(\tau), l_2(\tau) + ml\vec{v}), \tag{3.96}$$

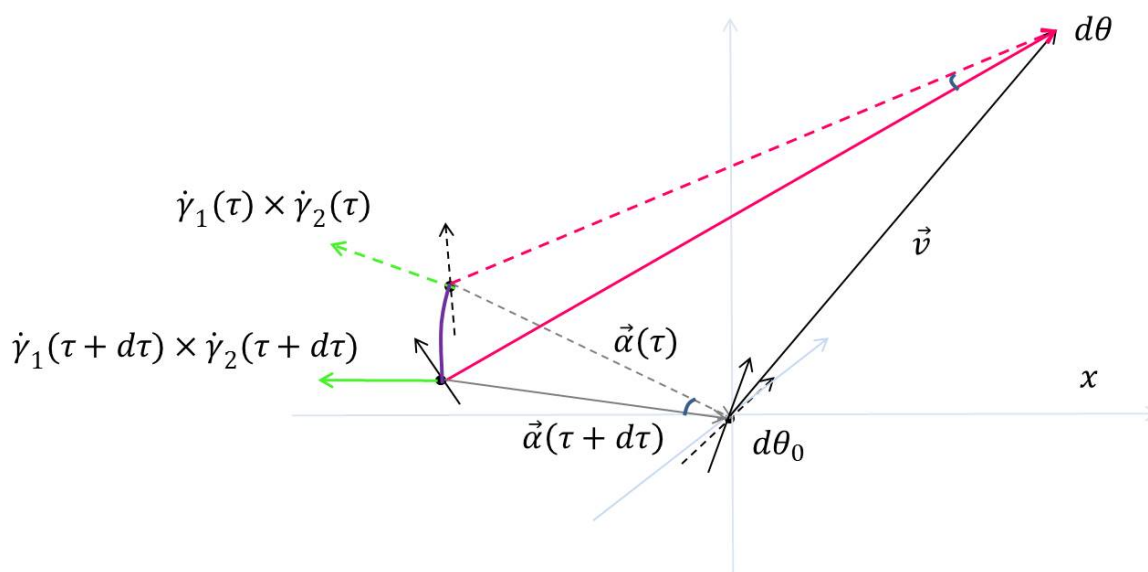
και

$$\mathcal{F}_n : \tau \rightarrow \sum_m \sum_{\substack{\vec{v}: |\vec{v}|^2=n \\ \gcd(v_1, v_2, v_3)=1}} (L_{m\vec{v}}(\vec{r}(\tau)) + L_{-m\vec{v}}(\vec{r}(\tau))). \tag{3.97}$$

Άρα $\Phi(\tau) = \sum_n \mathcal{F}_n(\tau)$. Στη συνέχεια θα αποδείξουμε ότι $\Phi'(\tau) = \frac{d}{d\tau} \sum_n \mathcal{F}_n(\tau) < \infty$.

Παρατηρούμε πρώτα ότι η $\mathcal{F}_n(\tau)$ συγκλίνει και είναι συνεχής: Πράγματι, η $\mathcal{F}_n(\tau)$ είναι ένα πεπερασμένο άθροισμα πάνω από τα v_1, v_2, v_3 , και ένα άπειρο άθροισμα πάνω από το m και από το Λήμμα 3.2.15, $|\mathcal{L}_{\pm m\vec{v}}(\tau)| < O(1/((m\sqrt{n})^2))$, άρα η $\mathcal{F}_n(\tau)$ συγκλίνει ομοιόμορφα. Άρα, αφού οι $\mathcal{L}_{\pm m\vec{v}}(\tau)$ είναι συνεχείς και η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη, η $\mathcal{F}_n(\tau)$ είναι συνεχής.

Στη συνέχεια παρατηρούμε ότι η $\mathcal{F}_n(\tau)$ είναι διαφορίσιμη: Πράγματι, οι $\mathcal{L}_{m\vec{v}}, \mathcal{L}_{-m\vec{v}}$ είναι διαφορίσιμες στο χώρο των διαμορφώσεων και είναι φραγμένη από πάνω από (Λήμμα 3.2.16):



Σχήμα 3.9: Έστω I_0, J_0 οι πρωταρχικές εικόνες των ελεύθερων ακμών I, J , με παραμετρικοποιήσεις $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$, $t, s \in [0, 1]$ αντίστοιχα. Έστω \vec{a} το διάνυσμα που ενώνει το σημείο βάσης της I_0 σε αυτό της J_0 , έστω β_j . Ας περιστρέψουμε το \vec{a} γύρω από το β_j , διατηρώντας τα I_0, J_0 άκαμπτα στο \vec{a} , δηλαδή διατηρώντας την σχετική θέση των \vec{a} με τα I_0, J_0 σταθερά. Έστω ότι το \vec{a} περιστρέφεται, τότε το ίδιο κάνει και το $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$, ώσπου $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2 = (\|\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2\|, 0, 0)$. Έστω $\theta(\tau)$ η γωνία μεταξύ των $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2$ και $\vec{a}(\tau) + \vec{v}$ και $\theta_0(\tau)$ η γωνία περιστροφής του \vec{a} . Τότε $d\theta \approx \sin d\theta \approx \frac{\|\vec{a}\|d\theta_0}{\|\vec{v} + \vec{a}\|}$.

$$\left| \frac{d}{d\tau} \left(\mathcal{L}_{m\vec{v}}(\tau) \right) \right| \leq \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{(ml\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} + \frac{\|\vec{\alpha}'\|}{(ml\|\vec{v}\| - \|\vec{\alpha}\| - b)^3} \right), \quad (3.98)$$

και παρόμοια για την $\frac{d}{d\tau} \left(\mathcal{L}_{-m\vec{v}}(\tau) \right)$. Άρα η $\sum_m \sum_{\vec{v}: \|\vec{v}\|^2=n} \left(\frac{d\mathcal{L}_{m\vec{v}}(\tau)}{d\tau} + \frac{d\mathcal{L}_{-m\vec{v}}(\tau)}{d\tau} \right)$ συγχλίνει ομοιόμορφα, και άρα η $\mathcal{F}_n(\tau)$ είναι διαφορίσιμη, και

$$\frac{d\mathcal{F}_n(\tau)}{d\tau} = \sum_m \sum_{\vec{v}: \|\vec{v}\|^2=n} \frac{d}{d\tau} \left(\mathcal{L}_{m\vec{v}}(\tau) + \mathcal{L}_{-m\vec{v}}(\tau) \right). \quad (3.99)$$

Ας μελετήσουμε την σύγκλιση του $\sum_n \frac{d}{d\tau} \mathcal{F}_n(\tau)$. Παρατηρούμε ότι το $\sum_n \frac{d}{d\tau} \mathcal{F}_n(\tau)$ μπορεί να γραφτεί σαν:

$$\begin{aligned} \sum_n \frac{d}{d\tau} \mathcal{F}_n(\tau) &= \sum_{n>n_0} \sum_{\substack{\vec{v}: \|\vec{v}\|^2=n \\ \gcd(v_1, v_2, v_3)=1}} \sum_m \frac{d}{d\tau} \left(\mathcal{L}_{m\vec{v}}(\tau) + \mathcal{L}_{-m\vec{v}}(\tau) \right) \\ &+ \sum_{n \leq n_0} \sum_{\substack{\vec{v}: \|\vec{v}\|^2=n \\ \gcd(v_1, v_2, v_3)=1}} \sum_m \left(\frac{d}{d\tau} \mathcal{L}_{m\vec{v}}(\tau) + \frac{d}{d\tau} \mathcal{L}_{-m\vec{v}}(\tau) \right). \end{aligned} \quad (3.100)$$

Έστω T_1 και T_2 το πρώτο και το δεύτερο άθροισμα, αντίστοιχα. Για τους όρους στο T_1 το Λήμμα 3.3.14 μπορεί να εφαρμοστεί:

$$\begin{aligned} T_1 &\leq \sum_m \sum_{n>n_0} \sum_{\substack{\vec{v}: \|\vec{v}\|^2=n \\ \gcd(v_1, v_2, v_3)=1}} \sum_m \frac{21\|\vec{\alpha}\|^2}{2\pi} \frac{1}{(ml\|\vec{v}\| - 3\|\vec{\alpha}\|)^4} \\ &= \frac{21\|\vec{\alpha}\|^2}{2\pi} \sum_m \sum_{n>n_0} \frac{R_3(n)}{(ml\sqrt{n} - 3\|\vec{\alpha}\|)^4} \\ &\leq \frac{21\|\vec{\alpha}\|^2}{2\pi l^4} \sum_m \frac{1}{m^4} \sum_{n>n_0} \frac{R_3(n)}{(\sqrt{n} - 3\|\vec{\alpha}\|/l)^4} \leq \frac{21\zeta(4)}{8\pi l^2} \sum_{n>n_0} \frac{R_3(n)}{(\sqrt{n} - 2)^4} < \infty, \end{aligned} \quad (3.101)$$

και η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη.

Χρησιμοποιώντας την Εξ. 3.98 παίρνουμε το παρακάτω άνω φράγμα για το T_2 :

$$\begin{aligned}
T_2 &< \frac{1}{2\pi} \sum_{n \leq n_0} \sum_{\substack{\vec{v}: \|\vec{v}\|^2 = n \\ \gcd(v_1, v_2, v_3) = 1}} \sum_m \left(\frac{1}{(ml - \|\vec{\alpha}\| - b)^2} + \frac{\|\vec{\alpha}'(\tau)\|}{(ml - \|\vec{\alpha}\| - b)^3} \right) \\
&< \frac{1}{2\pi} \sum_{n \leq n_0} r_3(n) \left(\frac{4}{(l-2b)^2} + \frac{4l}{(l-2b)^3} + \sum_{m>1} \left(\frac{1}{(ml-l)^2} + \frac{l/2}{(ml-l)^3} \right) \right) \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{n \leq n_0} r_3(n) \left(\frac{4}{(l-2b)^2} + \frac{4l}{(l-2b)^3} + \frac{\zeta(2)}{l^2} + \frac{\zeta(3)}{2l^2} \right) \\
&= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{4}{(l-2b)^2} + \frac{4l}{(l-2b)^3} + \frac{1}{l^2} (\zeta(2) + \frac{\zeta(3)}{2}) \right) \sum_{n \leq n_0} r_3(n) < \infty,
\end{aligned} \tag{3.102}$$

και η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη. Άρα η $\sum_n \frac{d}{d\tau} \mathcal{F}_n(\tau) = T_1 + T_2$ συγκλίνει ομοιόμορφα. Άρα,

$$\sum_n \frac{d}{d\tau} \mathcal{F}_n(\tau) = \frac{d}{d\tau} \sum_n \mathcal{F}_n(\tau) = \Phi'(\tau) < \infty, \tag{3.103}$$

και, αφού η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη, η $\Phi'(\tau)$ είναι συνεχής. □

Θεώρημα 3.3.16. *Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης δύο ελεύθερων ακμών I, J σε τρεις ΠΣΣ συγκλίνει.*

Απόδειξη. Οι δύο ελεύθερες ακμές I, J αντιστοιχούν σε μία διαμόρφωση \vec{x}_1 στον Ω . Όπως είπαμε στην εισαγωγή αυτής της παραγράφου, το \vec{x}_1 μπορεί να μεταλλαχθεί σε μία άλλη διαμόρφωση $\vec{x}_0 \in \Omega$ η οποία αντιστοιχεί σε δύο ελεύθερες ακμές I', J' με πρωταρχικές εικόνες I'_0, J'_0 με παραμετρικοποιήσεις $\gamma_1(\tau), \gamma_2(s)$, τέτοιες ώστε $\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2 = (\|\dot{\gamma}_1 \times \dot{\gamma}_2\|, 0, 0)$. Έστω $\vec{r}(\tau)$ ένα μονοπάτι από το \vec{x}_0 στο \vec{x}_1 τέτοιο ώστε $\phi(\tau), \psi(\tau), \|\vec{\alpha}(\tau)\|$, τότε

$$\begin{aligned}
\int \nabla LK_P(\vec{x}) \cdot ds &= LK_P(\vec{r}(1)) - LK_P(\vec{r}(0)) \Leftrightarrow LK_P(\vec{x}_1) \\
&= LK_P(\vec{x}_0) + \int \nabla LK_P(\vec{x}) \cdot ds.
\end{aligned} \tag{3.104}$$

Από το Λήμμα 3.3.12 $LK_P(\vec{x}_0) < \infty$. Επίσης, για αυτό το μονοπάτι το Λήμμα 3.3.15 μπορεί να εφαρμοστεί, και άρα, $\int \nabla LK_P(\vec{x}) \cdot ds < \infty$. Άρα ο LK_P συγκλίνει ομοιόμορφα και από το Λήμμα 3.3.12 και 3.3.15, φράσσεται από πάνω από:

$$\begin{aligned}
 LK_P(\vec{x}) &\leq \frac{1}{2} + \frac{24}{\pi l^2} \sqrt{n_0} \sum_{n>n_0} r_2(n) \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} \\
 &+ \frac{12}{\pi l^2} (\sqrt{n_0} - 1) \sqrt{n_0} \sum_{n>n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} \\
 &+ \frac{12}{\pi} \left(\frac{4}{(l-2b)^2} + \sum_{2 \leq n < 3n_0} \frac{r_3(n)}{((\sqrt{n} - 1)^2 l^2)} \right) + \left(\frac{21\zeta(4)}{8\pi l^2} \sum_{n>n_0} \frac{R_3(n)}{(\sqrt{n} - 2)^4} \right. \\
 &\left. + \frac{1}{2\pi} \left(\frac{4}{(l-2b)^2} + \frac{4l}{(l-2b)^3} + \frac{1}{l^2} (\zeta(2) + \frac{\zeta(3)}{2}) \right) \sum_{n \leq n_0} r_3(n) \right).
 \end{aligned} \tag{3.105}$$

□

Παρατήρηση 3.3.17. Χρησιμοποιώντας τις προσεγγίσεις $r_2(n) \approx \pi$, $r_3(n) \approx \frac{4\pi}{3} \sqrt{n}$, $R_3(n) \approx \frac{4\pi}{3\zeta(3)\sqrt{n}}$ και $\sum_{n \leq n_0} r_3(n) \approx \frac{4\pi}{3} n_0 \sqrt{n_0}$, παίρνουμε το παρακάτω άνω φράγμα

$$\begin{aligned}
 LK_P(\vec{x}) &\leq \frac{1}{2} + \frac{24}{l^2} \sqrt{n_0} \sum_{n>n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} + \frac{12}{\pi l^2} (\sqrt{n_0} - 1) \sqrt{n_0} \sum_{n>n_0} \frac{1}{(\sqrt{n} - 3/2)^3} \\
 &+ \frac{12}{\pi} \left(\frac{4}{(l-2b)^2} + \frac{4\pi}{3} \sum_{2 \leq n < 3n_0} \frac{\sqrt{n}}{((\sqrt{n} - 1)^2 l^2)} \right) + \frac{7\zeta(4)}{2\zeta(3)l^2} \sum_{n>n_0} \frac{\sqrt{n}}{(\sqrt{n} - 2)^4} \\
 &+ \frac{2}{3} \left(\frac{4}{(l-2b)^2} + \frac{4l}{(l-2b)^3} + \frac{1}{l^2} (\zeta(2) + \frac{\zeta(3)}{2}) \right) n_0 \sqrt{n_0}.
 \end{aligned} \tag{3.106}$$

Παρατηρούμε ότι για $L_{Cb} = 50$, $l = 1$, $n_0 = 10$, τα οποία είναι κατάλληλα μεγέθη για ροσομοίωση πολυμερικών τμημάτων, για δύο ακμές σε ένα σύστημα με τρεις ΠΣΣ η Εξ. 3.106 δίνει $LK_P(I, J) < 0.5554554$.

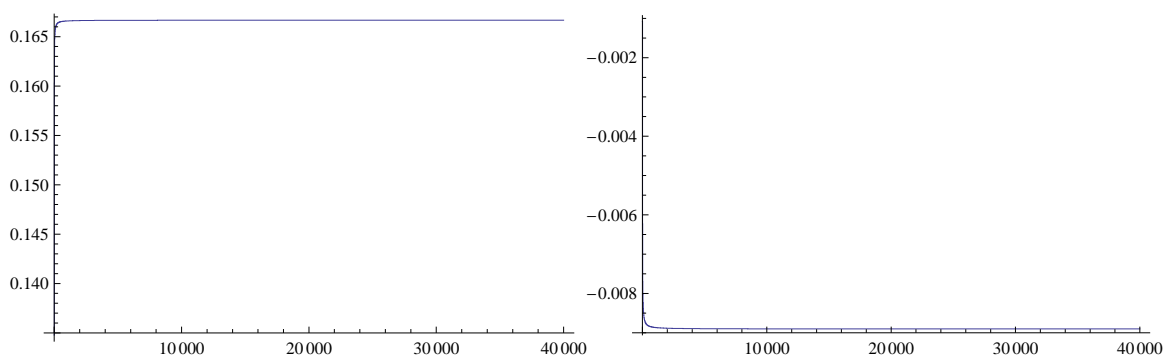
Πόρισμα 3.3.18. Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης ανοιχτών ελεύθερων ακμών είναι συνεχής συνάρτηση των συντεταγμένων των αλυσίδων σχεδόν παντού.

Πόρισμα 3.3.19. Ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης μίας ελεύθερης ακμής σε μία, δύο ή τρεις ΠΣΣ συγκλίνει και είναι συνεχής συνάρτηση των συντεταγμένων σχεδόν παντού.

3.3.4 Αριθμητικά Αποτελέσματα

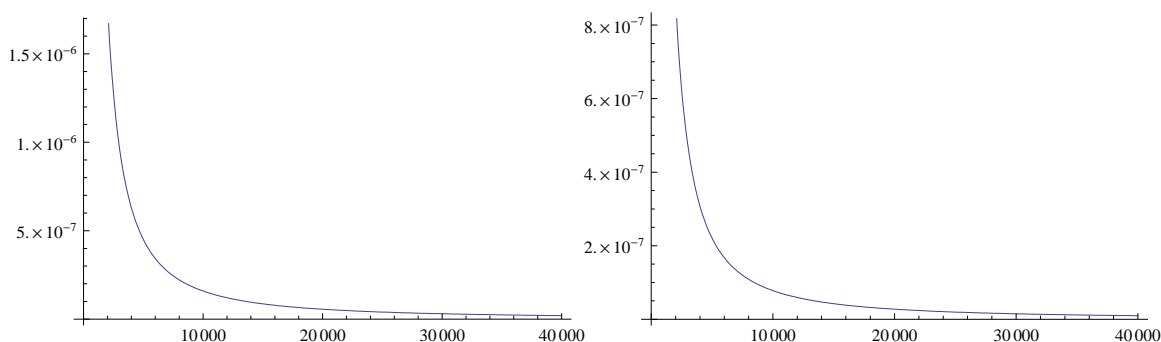
Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα επιβεβαιώνουν την σύγκλιση στην περίπτωση ενός συστήματος με μία ΠΣΣ, που αποδείχθηκε στο 3.3.1 (δείτε Εικόνα 3.10). Τα δεδομένα δείχνουν τα μερικά αθροίσματα από $n = 1$ έως $n = 40000$. Η πρώτη εικόνα αντιστοιχεί στο ζεύγος πρωταρχικών ακμών: $\vec{l}_1 = \{(0, 0, -1/2), (0, 0, 1/2)\}$ και $\vec{l}_2 = \{(-1/2, -1/2, 0), (-1/2, 1/2, 0)\}$, όπου

οι ΠΣΣ εφαρμόζονται στον x -άξονα. Τα δεδομένα ακολουθούν μία καμπύλη στις μορφές $u * x^v$, όπου $u = 0$ και $v = 1$, που υποδεικνύουν ότι ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης συγκλίνει πολύ σύντομα στην τιμή 0.166665. Η δεύτερη εικόνα δείχνει την περίπτωση μίας τυχαίας διαμόρφωσης: $\vec{l}'_1 = \{(0.56916, -0.933527, -0.0700424), (0.384144, -0.396046, 0.277891)\}$ και $\vec{l}'_2 = \{(-0.105847, 0.544368, -0.258865), (-0.354166, 0.756421, 0.447822)\}$. Παρατηρούμε μία παρόμοια συμπεριφορά, όπου ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης τώρα συγκλίνει στην τιμή -0.00890185 .



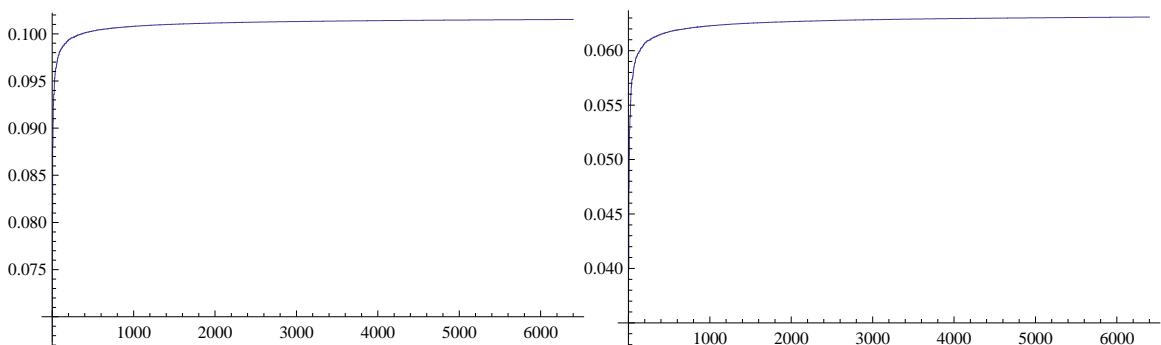
Σχήμα 3.10: Μία ΠΣΣ. Τα δεδομένα δείχνουν τα μερικά αθροίσματα από $n = 1$ έως $n = 40000$. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, με $u = 0$ και $v = 1$. Η πρώτη γραφική παράσταση αντιστοιχεί στην ειδική διαμόρφωση και η δεύτερη σε μία τυχαία διαμόρφωση.

Η Εικόνα 3.11 δίνει την διαφορά των αριθμών περιέλιξης αντίθετων μεταφορών. Το διάνυσμα μεταφοράς είναι το $\pm m\vec{v} = (\pm m, 0, 0)$, $m \in \mathbb{N}$. Η πρώτη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την ειδική διαμόρφωση $\{(0, 0, -1/2), (0, 0, 1/2)\}$ και $\{(-1/2, -1/2, 0), (-1/2, 1/2, 0)\}$. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, όπου $u = 0.159155$ και $v = -1.5$ το οποίο επιβεβαιώνει το Λήμμα 3.3.6. Η επόμενη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για μία τυχαία διαμόρφωση \vec{l}'_1, \vec{l}'_2 . Τα δεδομένα ακολουθούν μία εξίσωση της μορφής $u * x^v$, όπου $u = 0.0766163$ και $v = -1.49797$ το οποίο επίσης επιβεβαιώνει το Λήμμα 3.3.6.



Σχήμα 3.11: Η διαφορά των αντίθετων μεταφορών στην περίπτωση της ειδικής διαμόρφωσης, και μίας τυχαίας διαμόρφωσης αντίστοιχα.

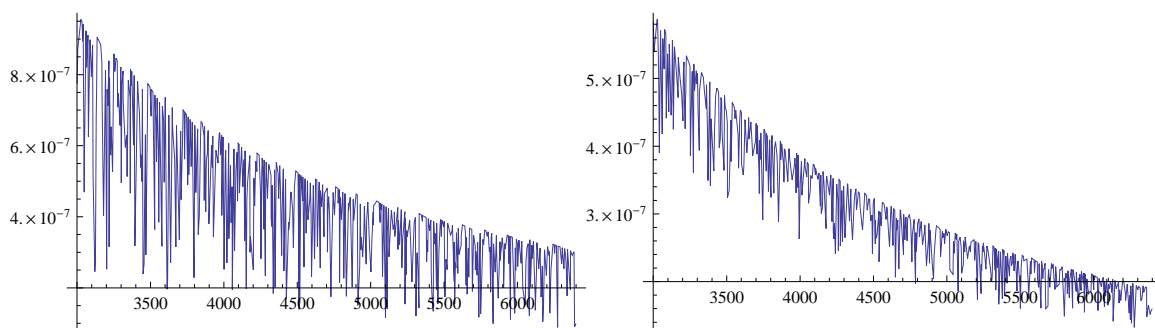
Τα αριθμητικά μας δεδομένα στην Εικόνα 3.12 επιβεβαιώνουν την σύγκλιση στην περίπτωση δύο ΠΣΣ, που αποδείχθηκε στο 3.3.7. Τα δεδομένα δείχνουν τα μερικά αθροίσματα από $n = 1$ έως $n = 80$. Η πρώτη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την ειδική διαμόρφωση. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, με $u = 0.0988229$ και $v = 0.0030873$, που υποδεικνύει ότι ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης των δύο ελεύθερων ακμών τείνει στο 0.10152. Η δεύτερη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την τυχαία διαμόρφωση που χρησιμοποιήσαμε πριν. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, με $u = 0.0601284$ και $v = 0.0055015$, που υποδεικνύει ότι ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης των δύο ακμών τείνει στο 0.0630835.



Σχήμα 3.12: Δύο ΠΣΣ. Τα δεδομένα δείχνουν τα μερικά αθροίσματα από $n = 1$ έως $n = 80$. Η πρώτη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την ειδική διαμόρφωση. Η δεύτερη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για μία τυχαία διαμόρφωση.

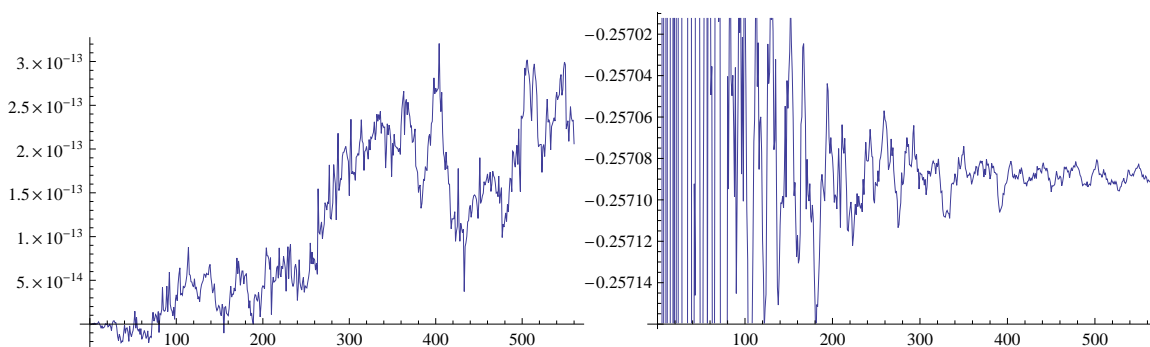
Η Εικόνα 3.13 δείχνει την διαφορά των αριθμών περιέλιξης αντίθετων μεταφορών. Το διάνυσμα μεταφοράς είναι το $\pm m\vec{v} = m(\pm v_1, \pm v_2, 0)$, $m, v_1, v_2 \in \mathbb{N}$. Η πρώτη εικόνα δείχνει

τα δεδομένα για την ειδική διαμόρφωση. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, όπου $u = 0.150336$ και $v = -1.51938$ που επιβεβαιώνει το Λήμμα 3.3.6. Η δεύτερη εικόνα δείχνει την περίπτωση μίας τυχαίας διαμόρφωσης. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, όπου $u = 0.080145$ ανδ $v = -1.48682$ το οποίο επίσης επιβεβαιώνει το Λήμμα 3.3.6.



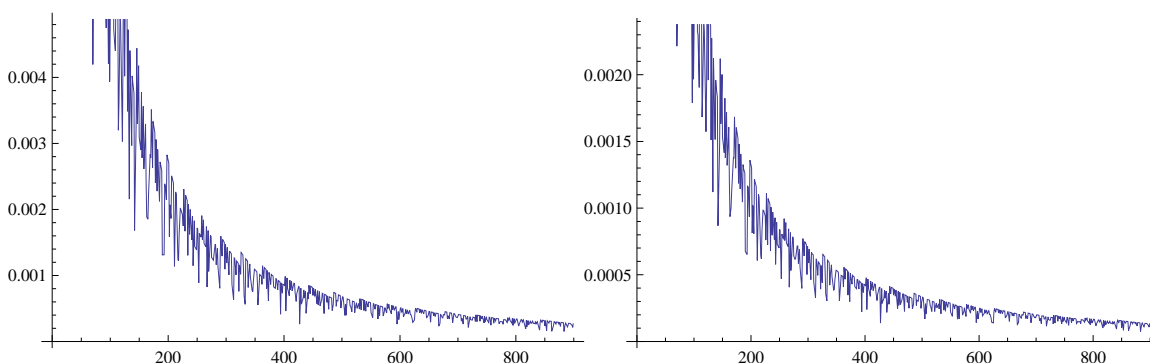
Σχήμα 3.13: Δύο ΠΣΣ. Η διαφορά των αριθμών περιέλιξης αντίθετων μεταφορών για την ειδική και για μία τυχαία διαμόρφωση αντίστοιχα.

Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα στην Εικόνα 3.14 (α) επιβεβαιώνουν την σύγκλιση για την ειδική διαμόρφωση στην περίπτωση τριών ΠΣΣ, που αποδείχθηκε στην 3.3.12 και γενικεύθηκε στην 3.3.16. Τα δεδομένα δείχνουν τα μερικά αθροίσματα από $n = 1$ έως το $n = 30$. Η πρώτη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την ειδική διαμόρφωση. Τα δεδομένα ακολουθούν μία καμπύλη της μορφής $u * x^v$, με $u = 0.095931$ και $v = 0.00673545$, που υποδεικνύει ότι ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης των δύο ακμών τείνει στο $2.05992 * 10^{-13}$. Η δεύτερη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την τυχαία διαμόρφωση που μελετήσαμε πριν. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, με $u = 0.0601284$ και $v = 0.0055015$, που υποδεικνύει ότι ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης τείνει στο -0.257091 , άρα επιβεβαιώνει το Θεώρημα 3.3.16.



Σχήμα 3.14: Τρεις ΠΣΣ. Τα δεδομένα δείχνουν τα μερικά αθροίσματα από $n = 1$ έως $n = 80$. Η πρώτη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την ειδική διαμόρφωση ενώ η δεύτερη για την τυχαία.

Η Εικόνα 3.15 δείχνει την διαφορά των αριθμών περιέλιξης των αντίθετων μεταφορών. Το διάνυσμα μεταφορών είναι το $\pm m\vec{v} = m(\pm v_1, \pm v_2, 0)$, $m, v_1, v_2 \in \mathbb{N}$. Η πρώτη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την ειδική διαμόρφωση. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, με $u = 4.78072$ και $v = -1.45841$ που επιβεβαιώνει το Λήμμα 3.3.6. Η επόμενη εικόνα δείχνει τα δεδομένα για την τυχαία διαμόρφωση. Τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $u * x^v$, όπου $u = 1.88333$ και $v = -1.41697$ που επιβεβαιώνει επίσης το Λήμμα 3.3.6.



Σχήμα 3.15: Τρεις ΠΣΣ. Η διαφορά των αριθμών περιέλιξης αντίθετων μεταφορών στην ειδική περίπτωση στην και για μία τυχαία διαμόρφωση αντίστοιχα.

3.4 Ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης, LK

Για την εφαρμογή σε τήγματα πολυμερών, όπου η πυκνότητα είναι μεγάλη, τα τοπολογικά εμπόδια έχουν έναν πολύ τοπικό χαρακτήρα και κανείς μπορεί να προτιμήσει να επικεντρωθεί μόνο στα τοπικά εμπόδια [40, 132, 133, 59]. Τοπικά τοπολογικά εμπόδια είναι αυτές οι σφιχτές διαμορφώσεις των τόξων μέσα σε ένα κελί που αποτελούν εμπόδια σε μικρές κινήσεις μίας αλυσίδας, αφού μία αλυσίδα απαγορεύεται να περάσει μέσα από τον εαυτό της ή μέσα από οποιαδήποτε άλλη αλυσίδα μέσα στο κελί με κινήσεις που αφήνουν τα τελικά σημεία της αταθερά. Άρα, το παρακάτω μέτρο τοπικής περιέλιξης μπορεί να είναι ένα καλύτερο μέτρο διαπλοκής για ένα τήγμα πολυμερούς.

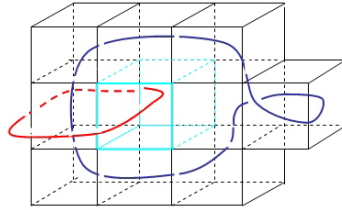
Ορισμός 3.4.1 (Τοπικός αριθμός περιέλιξης). Έστω I και J δύο ελεύθερες σε ένα περιοδικό σύστημα. Έστω J_1, J_2, \dots, J_n οι εικόνες της J που τέμνουν το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας εικόνας της I , έστω I_1 . Ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης, LK , μεταξύ δύο ελεύθερων αλυσίδων I και J ορίζεται ως:

$$LK(I, J) = \sum_{1 \leq u \leq n} L(I_1, J_u) \quad (3.107)$$

Παράδειγμα 3: Παρατηρήστε το κελί που φαίνεται στην Εικόνα 3.1c. Τότε για τον υπολογισμό του $LK(I, J)$ πρέπει να θεωρήσουμε τις εικόνες της J που τέμνουν το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της I_1 , όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.1c: $LK(I, J) = L(I_1, J_1) + L(I_1, J_2) + L(I_1, J_3) + L(I_1, J_4)$.

Παρατηρούμε ότι εάν οι αλυσίδες δεν ακουμπάν τις έδρες του κελιού, και άρα κείτονται εντελώς μέσα στο κελί, οι LK_P και LK ισούνται με τον αριθμό περιέλιξης των δύο αλυσίδων.

Παρατήρηση 3.4.2. Ο τοπικός αριθμός περιέλιξης, LK , εξαρτάται από το μέγεθος του κελιού. Επίσης, καθώς το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μπορεί να αλλάζει κατά την κίνηση του I , τότε ο LK μπορεί επίσης να αλλάζει. Άρα ο LK δεν είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη για δύο κλειστές ελεύθερες αλυσίδες. Το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας εικόνας, έστω I_1 , είναι ομοιομορφικό με μία 3-πολλαπλότητα, έστω M . Εάν το γένος της M είναι μεγαλύτερο του 0, μπορεί να υπάρχει μία εικόνα της J που είναι διαπλεγμένη με την I_1 αλλά που δεν τέμνει το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της I_1 (δείτε Εικόνα 3.16). Παρατηρούμε ωστόσο, ότι το μέγεθος ενός κελιού προσομοίωσης που είναι κατάλληλο για την προσομοίωση πολυμερικών τμημάτων και άλλων φυσικών συστημάτων, είναι τόσο μεγάλο που είναι αδύνατον να εμφανιστούν διαμορφώσεις σαν αυτή που φαίνεται στην Εικόνα 3.16. Άρα, στην πράξη, ο τοπικός περιοδικός περιέλιξης είναι αναλλοίωτος ιστοπίας για κλειστές αλυσίδες.



Σχήμα 3.16: Ένα παράδειγμα για το οποίο $LK \neq LK_P$. Η κόκκινη καμπύλη δεν τέμνει το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της μπλέ καμπύλης, αλλά είναι τοπολογικά διαπλεγμένες. Εάν η μπλέ καμπύλη κινηθεί μέσα στο μπλέ κελί, τότε η κόκκινη καμπύλη θα τέμνει το ελαχιστικό της ξεδίπλωμα και $LK = LK_P$.

Ιδιότητες του τοπικού περιόδου αριθμού περιέλιξης

Πρόταση 3.4.3. *Ο τοπικός περιόδου αριθμός περιέλιξης LK μεταξύ δύο ελεύθερων αλυσίδων I και J σε ένα σύστημα με ΠΣΣ είναι συμμετρικός, δηλαδή $LK(I, J) = LK(J, I)$.*

Απόδειξη. Έστω μία εικόνα της J , J_1 , που τέμνει το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας εικόνας της I , έστω I_1 . Τότε κάθε άλλη εικόνα της J που τέμνει το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της I_1 είναι μία μεταφορά της J_1 κατά ένα διάνυσμα \vec{v}_u . Τότε η I_1 τέμνει το ελαχιστικό ανάπτυγμα κάθε εικόνας $J_u = J_1 + \vec{v}_u$. Άρα η μεταφορά της I_1 κατά $-\vec{v}_u$, δηλαδή η $I_u = I_1 - \vec{v}_u$, τέμνει το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της J_1 .

□

Ο τοπικός αριθμός περιέλιξης είναι μία συνεχής συνάρτηση. Πράγματι, το σύνολο των σημείων ασυνέχειας στο χώρο των δυνατών διαμορφώσεων έχει μέτρο μηδέν, άρα ο LK είναι συνεχής συνάρτηση των συντεταγμένων των αλυσίδων σχεδόν παντού. Οι παρακάτω ιδιότητες έπονται από το γεγονός ότι ο LK είναι ένα μέτρο διαπλοκής που βασίζεται στον αριθμό περιέλιξης.

(i) Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων ο LK είναι ένας ακέραιος. Πράγματι, ισούται με το μισό αλγεβρικό άθροισμα διασταυρώσεων σε μία προβολή μίας εικόνας της I , έστω I_1 , και των προβολών των εικόνων της J που τέμνουν το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της I_1 σε μία τυχαία καταύθυνση προβολής. Για κλειστές αλυσίδες των οποίων το ελαχιστικό ξεδίπλωμα έχει γένος μηδέν, τότε ο LK είναι αναλλοίωτη ιστοπίας.

(ii) Στην περίπτωση ανοικτών αλυσίδων, ο LK ισούται με τον μέσο αλγεβρικό αριθμό των διασταυρώσεων μεταξύ της προβολής μίας εικόνας του I , έστω I_1 , και την προβολή των εικόνων

της J που τέμνουν το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της I_1 . Επιπλέον, καθώς τα τελικά σημεία των γεννητόρων αλυσίδων συγκλίνουν, ο LK τείνει στον τοπικό αριθμό περιέλιξης των κλειστών αλυσίδων.

Επιπλέον, ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης έχει τις παρακάτω ιδιότητες ως προς το μέγεθος του κελιού:

(i) ο LK λαμβάνει υπόψη όλες τις τοπικές διαπλοκές που η μία ελεύθερη αλυσίδα επιβάλλει σε μία εικόνα της άλλης, όμως λαμβάνει υπόψη και την γεωμετρική δομή των αλυσίδων σε μεγαλύτερη κλίμακα.

(ii) ο LK είναι ανεξάρτητος από την επιλογή του κελιού και της εικόνας της I που χρησιμοποιούμε για τον υπολογισμό του $LK(I, J)$ με μία άλλη ελεύθερη αλυσίδα J .

(iii) Για κλειστές αλυσίδες σε ένα περιοδικό σύστημα, κανείς μπορεί να κολλήσει περισσότερα κελιά για να φτιάξει ένα νέο μεγαλύτερο κελί έτσι ώστε $LK = LK_P$, και τότε ο LK είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη.

Προτερήματα του τοπικού αριθμού περιέλιξης για την μελέτη της περιέλιξης σε ΠΣΣ

Τα συστήματα που χρησιμοποιούν ΠΣΣ αποτελούνται από ένα άπειρο πλήθος μεταφορών ενός πεπερασμένου πλήθους αλυσίδων. Εφαρμόζοντας ένα παραδοσιακό μέτρο διαπλοκής θα απαιτούσε υπολογισμούς πάνω σε ένα άπειρο, ή τουλάχιστον πάρα πολύ μεγάλο πλήθος αλυσίδων. Ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης, LK , υπολογίζεται χρησιμοποιώντας ένα πεπερασμένο πλήθος κελιών και αλυσίδων, ελαττώνοντας την πολυπλοκότητα του υπολογισμού.

Ιδανικά, κανείς θα ήθελε να μετρήσει την διαπλοκή κατεύθειαν μέσα σπό ένα κελί, όμως τα τόξα των γεννητόρων αλυσίδων μέσα στο κελί είναι σχετικά κοντά. Για να λάβουμε υπόψη τους μεγαλύτερους βαθμούς διαπλοκής ένα μεγάλο πλήθος τόξων πρέπει να χρησιμοποιηθεί για να δημιουργήσει μία πολύπλοκη αλυσίδα.

Ο τοπικός αριθμός περιέλιξης υπολογίζεται μεταξύ μακριών πολυμερικών αλυσίδων, λαμβάνοντας υπόψη όλη την γεωμετρική δομή των αλυσίδων. Επιπλέον, εάν θέλαμε να περιοριστούμε σε μικρότερο πλήθος κελιών, θα ήταν αδύνατον να δώσουμε ένα συμμετρικό μέτρο διαπλοκής το οποία να λαμβάνει υπόψη όλα τα τοπικά εμπόδια. Πράγματι:

Πρόταση 3.4.4. *Ο τοπικός αριθμός περιέλιξης $LK(I, J)$ μεταξύ δύο κλειστών ή ανοικτών ελεύθερων αλυσίδων I και J λαμβάνει υπόψη όσο το δυνατόν λιγότερα κελιά που είναι απαραίτητα για να μετρήσουμε όλα τα τοπικά εμπόδια που μία ελεύθερη αλυσίδα επιβάλλει σε μία εικόνα της άλλης και την ίδια στιγμή είναι συμμετρικός.*

Περίληψη απόδειξης. Το ελαχιστικό ξεδίπλωμα (minimal unfolding (μ)) της I_1 περιέχει όλα τα τοπολογικά εμπόδια που επιβάλλονται στην I_1 από την J . Όμως έχουμε ότι $LK_{\mu}(I, J) = \sum_l L(I_1, j_l) \neq \sum_n L(J_1, i_n) = LK_{\mu}(J, I)$, όπου j_l, i_n είναι οι μεταφορές των τόξων της j και i

στο ελαχιστικό ξεδίπλωμα της I_1 και J_1 αντίστοιχα. Προσθέτοντας τους επιπλέον όρους σε κάθε άθροισμα ώσπου να λάβουμε ένα συμμετρικό μέτρο διαπλοκής παίρνουμε $LK_{mu} = LK$. \square

Ο τοπικός αριθμός αυτο-περιέλιξης

Για τις εφαρμογές, όπου οι αλυσίδες είναι ανοικτές ενδιαφερόμαστε σε έναν περιορισμό του περιοδικού αριθμού αυτο-περιέλιξης που να λαμβάνει όλα τα τοπολογικά εμπόδια που επιβάλλονται σε μία αλυσίδα από τις εικόνες της άλλης. Αντίστοιχα με τον ορισμό του τοπικού αριθμού περιέλιξης ορίζουμε:

Ορισμός 3.4.5 (Τοπικός αριθμός αυτο-περιέλιξης). Έστω I μία ελεύθερη αλυσίδα σε ένα περιοδικό σύστημα. Έστω I_2, \dots, I_n οι εικόνες της I που τέμνουν το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας εικόνας της I , έστω I_1 . Τότε ο τοπικός περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης, SL , μίας ελεύθερης αλυσίδας I ορίζεται ως:

$$SL(I) = Sl(I_1) + \sum_{2 \leq u \leq n} L(I_1, J_u) \quad (3.108)$$

Εάν αγνοήσουμε την στρέψη της αλυσίδας τότε αυτό γίνεται η τοπική περιοδική συστροφή:

$$WR(I) = Wr(I_1) + \sum_{2 \leq u \leq n} L(I_1, J_u) \quad (3.109)$$

Εάν αγνοήσουμε τον αριθμό αυτο-περιέλιξης μίας εικόνας τότε λαμβάνουμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων:

$$LKS(I) = \sum_{2 \leq u \leq n} L(I_1, J_u) \quad (3.110)$$

3.5 Ο αριθμός περιέλιξης κελιού, LK_C

Ένα μειονέκτημα του τοπικού περιοδικού αριθμού περιέλιξης είναι ότι δεν είναι τοπολογική αναλλοίωτη στην περίπτωση κλειστών ελεύθερων αλυσίδων. Επίσης, για ανοικτές αλυσίδες, ο ορισμός του τοπικού περιοδικού αριθμού περιέλιξης εξαρτάται από το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας εικόνας και καθώς η αλυσίδα κινείται, αλλάζει, δίνοντας ασυνέχειες. Παρατηρείστε ότι ο τοπικός αριθμός περιέλιξης ανοικτών αλυσίδων είναι ανεξάρτητος από το κελί και είναι ομοιόμορφα συνεχής στον χώρο των δυνατών διαμορφώσεων.

Άρα ένας πιο κατάλληλος περιορισμός του περιοδικού αριθμού περιέλιξης μπορεί να οριστεί ως εξής:

Ορισμός 3.5.1 (Κελί Αλυσίδας). Έστω I_1 μία εικόνα της ελεύθερης αλυσίδας I . Ορίζουμε το *Κελί Αλυσίδας*, $SC(I_1)$, σαν την ένωση του ελάχιστου πλήθους κελιών που απαιτούνται για να δημιουργήσουμε ένα μεγαλύτερο κυβικό κελί που περιέχει την I_1 και της οποίας το κεντρικό κελί είναι το κελί στο οποίο κείται το κέντρο βάρους της I_1 .

Ορισμός 3.5.2 (Περιοδικός αριθμός περιέλιξης κελιού). Έστω I και J δύο ελεύθερες αλυσίδες. Έστω J_1, J_2, \dots, J_n οι εικόνες της J που τέμνουν το $SC(I_1)$. Ο *περιοδικός αριθμός περιέλιξης κελιού*, $LK_C(I, J)$, ορίζεται ως:

$$LK_C(I, J) = \sum_{1 \leq u \leq m} L(I_1, J_u) \quad (3.111)$$

Πρωτερήματα του περιοδικού αριθμού περιέλιξης κελιού, LK_C , σε σύγκριση με τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης LK :

(i) Για κλειστές αλυσίδες ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης κελιού ισούται με τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης, δηλαδή $LK_C(I, J) = LK_P(I, J)$. Άρα ο LK_C είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη για κλειστές αλυσίδες.

(ii) Για ανοικτές αλυσίδες ο $LK_C(I, J)$ λαμβάνει υπόψην περισσότερες εικόνες αλυσίδων, και μπορεί να είναι καλύτερη προσέγγιση του $LK_P(I, J)$ από τον $LK(I, J)$ σε σχέση με το $LK_P(I, J)$.

(iii) Όπως οι ανοικτές αλυσίδες κινούνται, το $SC(I)$ αλλάζει, άρα δίνει ασυνέχειες στον LK_C , άρα αφού ο LK_C είναι καλή προσέγγιση του LK_P περιμένουμε ότι θα έχει μικρότερες διακυμάνσεις.

Παρατήρηση 3.5.3. Ομοίως, ορίζουμε τον περιοδικό αριθμό συστροφής κελιού και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων κελιού.

Παρατήρηση 3.5.4. Ο LK_C δεν είναι συμμετρικός. Παρ' όλα αυτά, περιμένουμε οι $LK_C(I, J)$ και $LK_C(J, I)$ να είναι καλές προσεγγίσεις του $LK_P(I, J) = LK_P(J, I)$.

3.6 Εφαρμογή στα πολυμερή

Σε αυτή την παράγραφο εφαρμόζουμε τα μέτρα διαπλοκής που αναπτύχθηκαν σε αυτό το κεφάλαιο σε πραγματικά τήγματα πολυμερούς.

3.6.1 Ο αλγόριθμος CReTA

Για να μελετήσουμε την διαπλοκή σε ένα πολυμερικό τήγμα, πρέπει να αδροποιήσουμε το σύστημα έτσι ώστε τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που σχετίζονται με την διαπλοκή να είναι εμφανή

[42]. Ο αλγόριθμος CReTA (Contour Reduction Topological Analysis) [132] κρατάει τα άκρα των αλυσίδων σταθερά στο χώρο, και απαγορεύοντας τις αλυσίδες να περνάν η μία μέσα από την άλλη ή από τον εαυτό τους, ελαχιστοποιεί ταυτόχρονα το μήκος των αλυσίδων, μέχρι να γίνουν σύνολα ευθύγραμμων τμημάτων που ενώνονται στις κορυφές ενός δικτύου. Όταν δεν υπάρχουν άλλες κινήσεις να γίνουν, τότε η διάμετρος των αλυσίδων μικραίνει και συνεχίζεται η ίδια διαδικασία, ώσπου φτάσουμε σε ένα ελάχιστο όριο πάχους. Η Εικόνα 3.1 δείχνει ένα ατομιστικό δείγμα πολυμερούς και το αντίστοιχο μειωμένο δίκτυο.

Ο αλγόριθμος CReTA [132, 133] δίνει χρήσιμη πληροφορία της τοπολογίας ενός πολυμερικού τήγματος σε σχέση με πειραματικά αποτελέσματα. Χρησιμοποιώντας τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης LK , καθορίζουμε τον βαθμό στον οποίο ο αλγόριθμος CReTA διατηρεί το μέτρο περιέλιξης σε πολυμερικά τήγματα, ή εάν χάνεται σημαντική τοπολογική πληροφορία κατά την εφαρμογή του. Επίσης, κάνουμε την ίδια σύγκριση αφού κλείσουμε τις ανοικτές αλυσίδες με μία επιπλέον ακμή.

Όπως αναφέραμε νωρίτερα, τα γραμμικά πολυμερή δεν είναι πεπλεγμένα με την τοπολογική έννοια. Μία μέθοδος για να μελετήσουμε την διαπλοκή των γραμμικών πολυμερών είναι να κλείσουμε τις αλυσίδες και να υπολογίσουμε τον τύπο κόμβου ή κρίκου που προκύπτει [50, 90]. Χρησιμοποιώντας το LK θα ελέγξουμε εάν η μέθοδος κλεισίματος προσθέτοντας μία ακμή [81, 50, 134] είναι αξιόπιστη και εάν ο LK μπορεί να διακρίνει τη διαφορά μεταξύ των ανοικτών και κλειστών αρχικών ή μειωμένων αλυσίδων.

Τα δεδομένα που αναλύσαμε αφορούν 80 δείγματα πολυαιθυλενίου (ΠΕ) [132] πυκνότητας $\rho \approx 0.77 - 0.78 \text{ g/cm}^3$. Κάθε δείγμα αποτελείται από 8 αλυσίδες ΠΕ από 1000 χάντρες η κάθε μία, άρα τελικά τα αποτελέσματά μας στον LK βασίζονται σε 2240 διαφορετικά ζεύγη αλυσίδων ΠΕ.

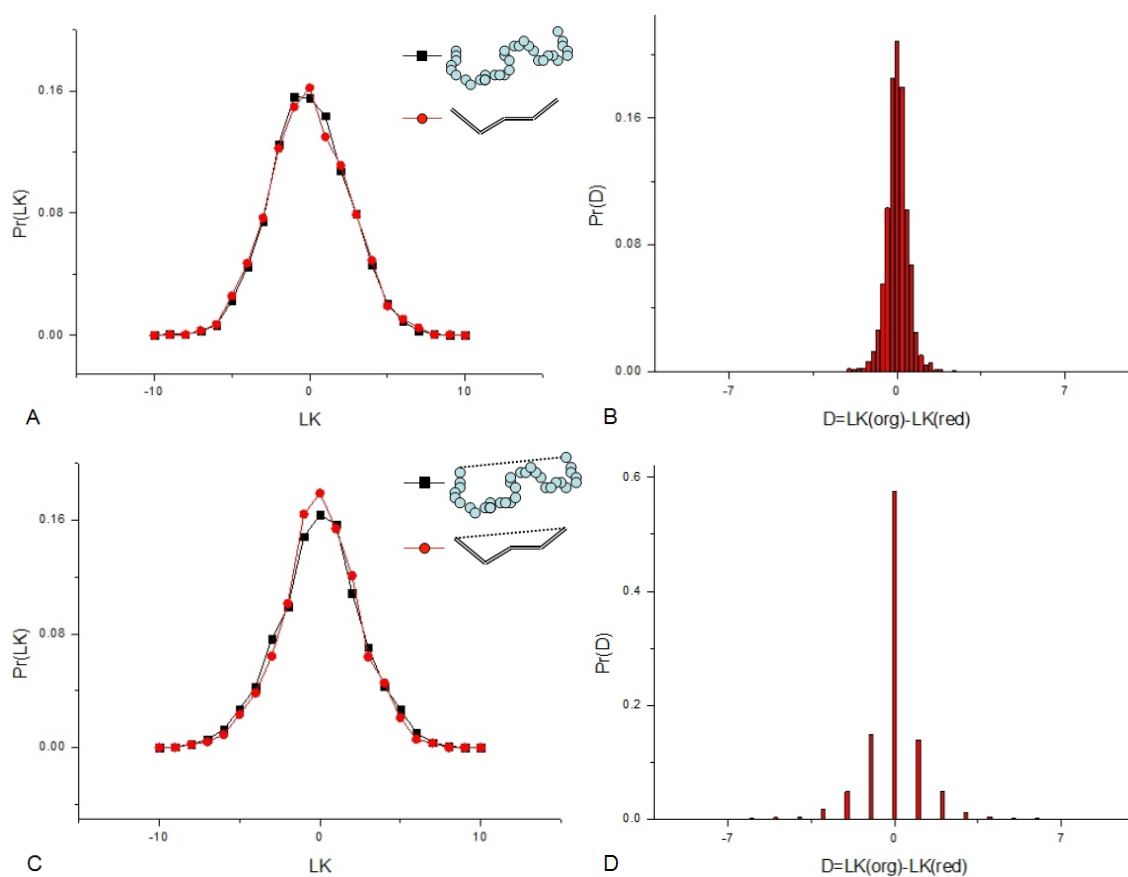
3.6.2 Ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης τμημάτων πολυαιθυλενίου

Αρχικά, υπολογίζουμε την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας της LK για ζεύγη ΠΕ αλυσίδων σε ένα δείγμα με τον LK για αυτών των αντίστοιχων μειωμένων ζευγών. Η Εικόνα 3.17A δείχνει ότι η κατανομή πιθανότητας του τοπικού περιοδικού αριθμού περιέλιξης για τις αρχικές και τις κατά CReTA μειωμένες αλυσίδες ΠΕ. Οι δύο κατανομές είναι σχεδόν παρόμοιες. Η μέση απόλυτη τιμή του LK είναι 1.97 και η μέση απόλυτη τιμή του LK για ζεύγη μειωμένων αλυσίδων είναι 2.01. Η Εικόνα 3.17B δείχνει την κατανομή πιθανότητας των διαφορών του LK πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA, δηλαδή $D = LK_{original} - LK_{reduced}$. Παρατηρούμε ότι η κατανομή είναι αρκετά λεπτή (με τυπική απόκλιση 0.30), έχει μέση τιμή -0.19 , και μέση απόλυτη διαφορά (δηλαδή $\langle |D| \rangle$) του τοπικού περιοδικού αριθμού περιέλιξης

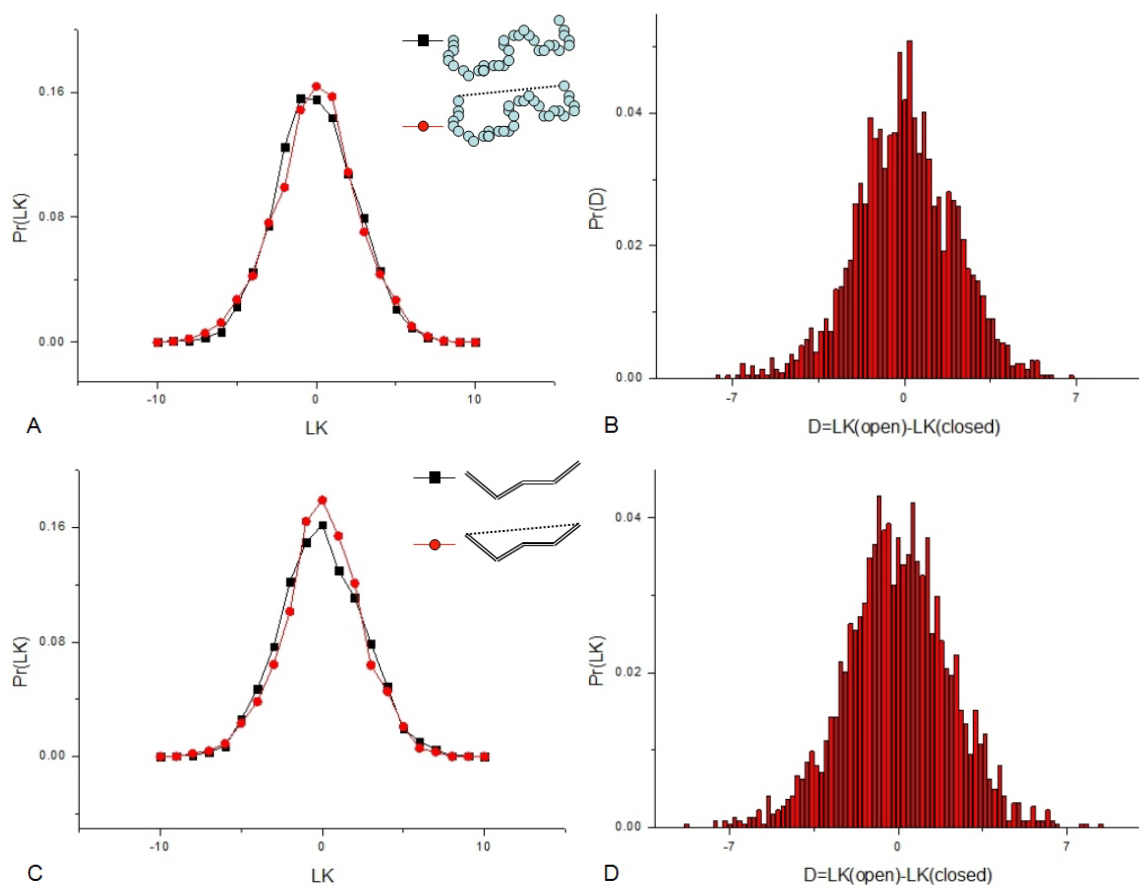
μεταξύ των αρχικών και μειωμένων αλυσίδων 0.29, που δείχνει ότι ο LK είναι σχεδόν το ίδιο για τις αρχικές και τις μειωμένες αλυσίδες. Άρα, τουλάχιστον σε σχέση με το LK , κανείς μπορεί να μελετάει την διαπλοκή ενός τήγματος ΠΕ στην μειωμένη του αναπαράσταση μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA.

Στη συνέχεια, υπολογίζουμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης LK αφού κάνουμε κλείσιμο των αρχικών αλυσίδων από άκρο σε άκρο και το συγκρίνουμε με το LK αφού κλείσουμε με τον ίδιο τρόπο τις μειωμένες αλυσίδες. Η Εικόνα 3.17C δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LK για τις κλειστές αρχικές και μειωμένες αλυσίδες. Παρατηρούμε μία μικρότερη ταύτιση των δύο κατανομών. Η μέση απόλυτη τιμή του LK των αρχικών κλειστών αλυσίδων είναι 2.01 και η μέση απόλυτη τιμή του LK για τις μειωμένες κλειστές αλυσίδες είναι 1.86. Η Εικόνα 3.17D δείχνει την κανονικοποιημένη ακατανομή πιθανότητας της διαφοράς $D = LK_{OrgClosed} - LK_{RedClosed}$. Μπορούμε να δούμε ότι η ακατανομή είναι λίγο πιο πλατιά με τυπική απόκλιση 0.92 σε σχέση με τα αρχικά δεδομένα. Η μέση απόλυτη διαφορά είναι 0.57. Όπως αναφέραμε στην Παρατήρηση 3.4.2, θα περιμέναμε ο LK να είναι αναλλοίωτος για κλειστές αλυσίδες στις περισσότερες περιπτώσεις. Το κλείσιμο γίνεται πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA. Άρα οι διαφορές μεταξύ των αρχικών και των μειωμένων αλυσίδων οφείλονται κατά το πιθανότερο σε κινήσεις κατά τις οποίες ο αλγόριθμος κάνει μία αλυσίδα να τέμνει το διάνυσμα του από άκρο εις άκρο κλεισίματος. Μπορούμε να δούμε ότι η μέθοδος του από άκρο εις άκρο κλεισίματος διατηρεί πολύ αλλά όχι όλη από την τοπολογική πληροφορία των αρχικών στα μειωμένα συστήματα.

Στη συνέχεια υπολογίζουμε την διαφορά μεταξύ του LK για τις ανοικτές και τις κλειστές αρχικές αλυσίδες και την διαφορά μεταξύ του LK των ανοικτών και κλειστών μειωμένων αλυσίδων. Οι Εικόνες 3.18A και 3.18C δείχνουν το κανονικοποιημένο LK για τις αρχικές ανοικτές και τις αντίστοιχες κλειστές αλυσίδες και τον κανονικοποιημένο LK για τις μειωμένες ανοικτές και τις αντίστοιχες κλειστές αλυσίδες αντίστοιχα. Και στις δύο περιπτώσεις, παρατηρούμε μία ακόμα μικρότερη ταύτιση μεταξύ των δύο κατανομών. Στις Εικόνες 3.18B και 3.18D φαίνεται η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας της διαφοράς $LK_{OrgOpen} - LK_{OrgClosed}$ και της διαφοράς $LK_{RedOpen} - LK_{RedClosed}$ αντίστοιχα. Μπορούμε να δούμε ότι οι κατανομές είναι πιο πλατιές, με τυπικές αποκλίσεις 2.00 και 1.91, αντίστοιχα. Η μέση απόλυτη διαφορά είναι 1.57 και 1.52 αντίστοιχα. Αυτό δείχνει ότι ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης διατηρεί παρόμοια αλλά διαφορετική πληροφορία για ανοικτές και κλειστές αλυσίδες.



Σχήμα 3.17: Η Εικόνα A δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LK για τις αρχικές και για τις μειωμένες αλυσίδες ενός τμήματος τμημάτων PE-1000 και η Εικόνα B την κατανομή πιθανότητας των αντίστοιχων διαφορών. Η Εικόνα C δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LK για τις αρχικές και για τις μειωμένες αλυσίδες μετά το από άκρο εις άκρο κλείσιμο και η Εικόνα D δείχνει τις αντίστοιχες διαφορές



Σχήμα 3.18: Η Εικόνα A δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LK για τις αρχικές αλυσίδες πριν και μετά το από άκρο εις άκρο κλείσιμο και η Εικόνα B την κατανομή πιθανότητας των αντίστοιχων διαφορών. Η Εικόνα C δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LK για τις μειωμένες αλυσίδες πριν και μετά το από άκρο εις άκρο κλείσιμο και η Εικόνα D δείχνει τις αντίστοιχες διαφορές.

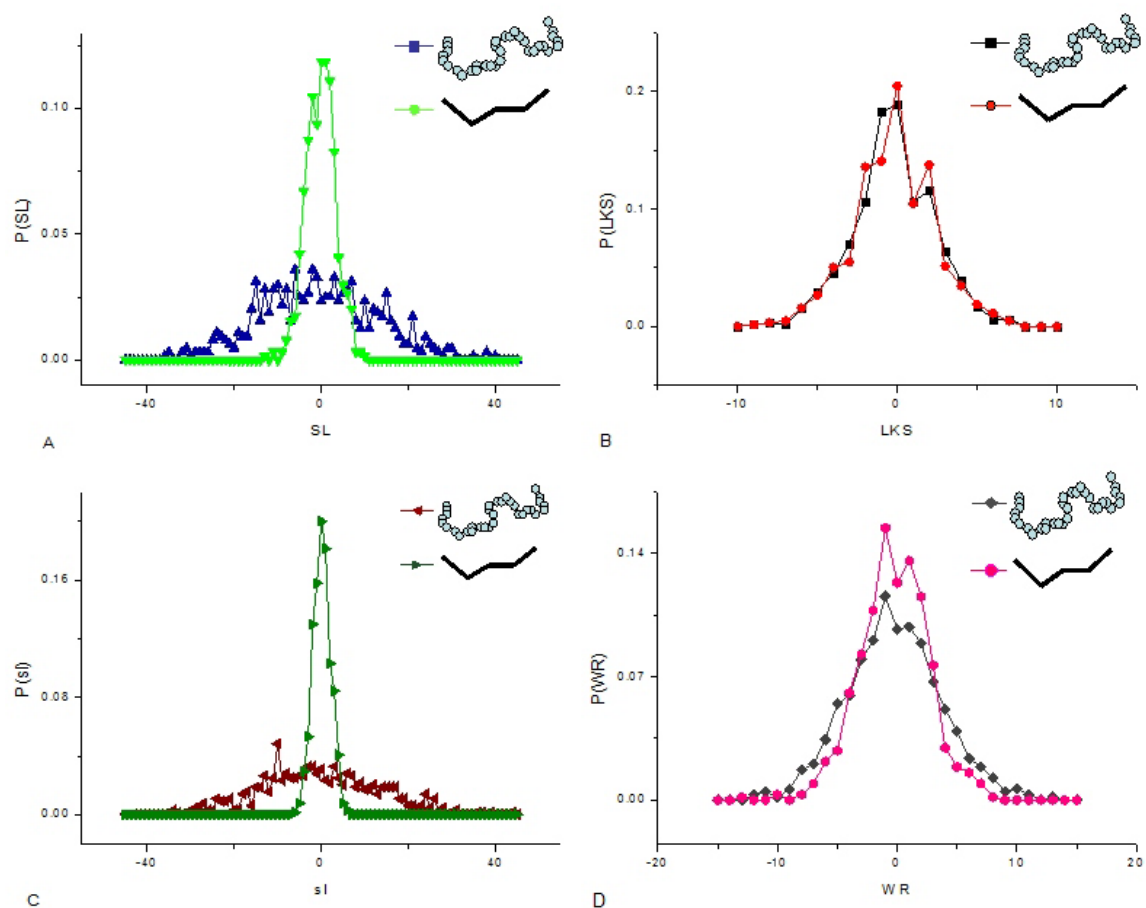
3.6.3 Ο τοπικός περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης τμημάτων πολυαιθυλενίου

Αρχικά, υπολογίζουμε την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SLP για τις αρχικές και μειωμένες αλυσίδες (Εικόνα 3.19A). Παρατηρούμε ότι τα δείγματα που λαμβάνουμε υπόψη για τα μέτρα αυτο-διαπλοκής αφορούν 620 αλυσίδες. Παρατηρούμε ότι τα αρχικά και μειωμένα συστήματα δίνουν διαφορετικά αποτελέσματα. Επίσης, παρατηρούμε ότι οι τιμές του SLP των αρχικών αλυσίδων βρίσκονται στο διάστημα $(-40, 40)$ που είναι πολύ μεγαλύτερο από αυτό του τοπικού εριοδικού αριθμού περιέλιξης, το οποίο είναι το $(-10, 10)$. Ο μέσος απόλυτος SLP είναι ίσος με 10.8933. Παρατηρούμε ότι είναι πολύ μεγαλύτερο από την αντίστοιχη τιμή του LK . Ο τοπικός περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης των μειωμένων αλυσίδων είναι πολύ μικρότερος από αυτόν των αρχικών. Η μέση απόλυτη τιμή του SL των μειωμένων αλυσίδων είναι 2.67215, ο οποίος είναι της τάξης της αντίστοιχης τιμής του LK . Ας υπενθυμίσουμε ότι ο τοπικός περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης είναι ένα άθροισμα δύο όρων:

$$SLP(I) = Sl(I_1) + \sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u) \quad (3.112)$$

όπου $Sl(I_1)$ είναι ο αριθμός αυτο-περιέλιξης μίας εικόνας και $\sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u)$ είναι το άθροισμα όλων των ολοκληρωμάτων Gauss μίας εικόνας με τις εικόνες της.

Ο αλγόριθμος CReTA διατηρεί τα τοπολογικά εμπόδια που επιβάλλουν οι περιοδικές εικόνες της μίας αλυσίδας σε μία από τις εικόνες της, άρα, όπως δείχνουν τα αριθμητικά μας αποτελέσματα στην προηγούμενη παράγραφο, περιμένουμε μία μικρή απόκλιση του δεύτερου όρου για τα αρχικά και τελικά συστήματα. Η Εικόνα 3.19B δείχνει ότι η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του περιοδικού αριθμού περιέλιξης αυτο-εικόνων, LK_{SL} για τις αρχικές και μειωμένες εικόνες. Παρατηρούμε ότι οι κατανομές των αρχικών και μειωμένες αλυσίδες είναι παρόμοιες. Η μέση τιμή του LK_{SL} για τα αρχικά συστήματα είναι 1.771092 που μοιάζει με τον LK μεταξύ των εικόνων άλλων αλυσίδων. Για τις μειωμένες αλυσίδες είναι 1.797891 που είναι πολύ κλειστά στις αντίστοιχες μειωμένες αλυσίδες. Η τιμή είναι λίγο μικρότερη απ'ότι ο LK μεταξύ άλλων εικόνων, που υποδεικνύει ότι μπορεί να υπάρχει λιγότερη περιέλιξη μεταξύ των αυτο-εικόνων. Αυτό δείχνει ότι η μεγάλη απόκλιση οφείλεται στον αριθμό αυτο-περιέλιξης μίας εικόνας. Η Εικόνα 3.19C δείχνει ότι η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του αριθμού αυτο-περιέλιξης μίας εικόνας κάθε ελεύθερης αλυσίδας για τις αρχικές και μειωμένες αλυσίδες (αυτός είναι ο πρώτος όρος στο άθροισμα του SLP). Παρατηρούμε μία παρόμοια διαφορά μεταξύ των αρχικών και των μειωμένων αλυσίδων όπως και στον SLP . Επίσης, οι τιμές είναι της ίδιας τάξης. Πράγματι, ο αριθμός αυτο-περιέλιξης μπορεί να εκφραστεί ως εξής:



Σχήμα 3.19: Α. Η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SL για τα αρχικά και τα μειωμένα συστήματα. Β. Η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LKS για τα αρχικά και τα μειωμένα συστήματα. Γ. Η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του sl για τα αρχικά και τα μειωμένα συστήματα. Δ. Η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του WR για τα αρχικά και τα μειωμένα συστήματα.

$$Sl(I_1) = Wr(I_1) + \tau(I_1) \quad (3.113)$$

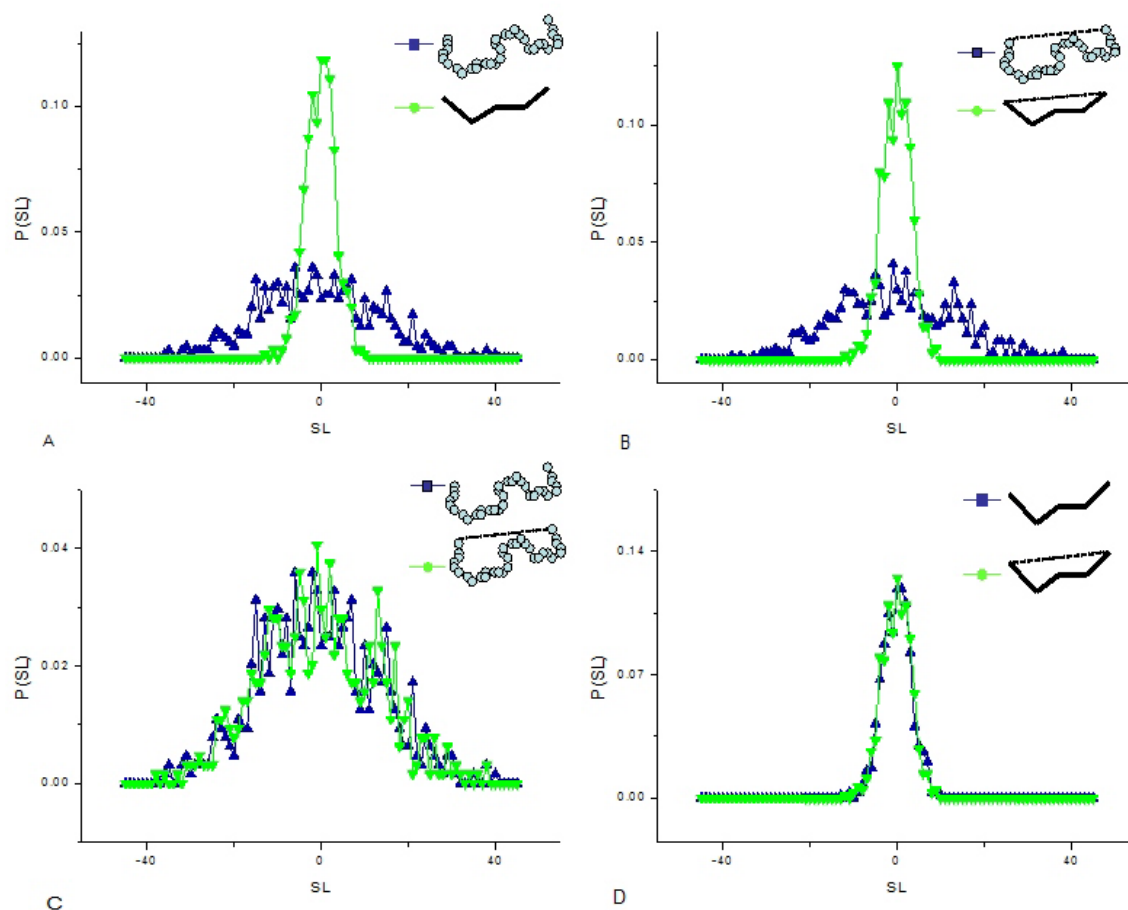
όπου ο $Wr(I_1)$ είναι η συστροφή μίας εικόνας και $\tau(I_1)$ η ολική στρέψη μίας εικόνας. Περιμένουμε ότι η ολική στρέψη μίας αλυσίδας θα επηρεαστεί σημαντικά από την διαδικασία της μείωσης, αφού οι αλυσίδες τείνουν να γίνουν πιο γραμμικές και επίπεδες. Από την άλλη, δεν περιμένουμε πολύ μεγάλη διαφορά για την συστροφή μίας αλυσίδας. Η Εικόνα 3.19D δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του WR_P για τα αρχικά και τα μειωμένα συστήματα. Υπενθυμίζουμε ότι αυτό εκφράζεται ως

$$\begin{aligned} WR_P(I) &= Wr(I_1) + \sum_{u \neq 1} L(I_1, I_u) \\ &= Wr(I_1) + LK_{SL} \end{aligned} \quad (3.114)$$

Παρατηρούμε ότι οι τιμές είναι της ίδιας τάξης όπως ο LK_{SL} , αλλά η μέση απόλυτη τιμή είναι 3.013212, που είναι μεγαλύτερος, όπως αναμένεται, αφού η συστροφή μίας αλυσίδας προστίθεται. Η μέση απόλυτη συστροφή είναι 2.3383. Για τα μειωμένα συστήματα ο μέσος απόλυτος LK_{SL} είναι 2.125795. Η μέση απόλυτη συστροφή των μειωμένων αλυσίδων είναι 0.971465. Άρα, η παρατηρούμενη διαφορά οφείλεται στην συστροφή των αρχικών και μειωμένων αλυσίδων. Η συστροφή επηρεάζεται από την διαμόρφωση των αλυσίδων, και καθώς τείνουν να γίνονται γραμμικές, μικραίνει. Ο αλγόριθμος CReTA μπορεί να επιτρέψει στις αλυσίδες να τέμνουν τον εαυτό τους, αλλά αυτό είναι σπάνιο και δεν θα πρέπει να επηρεάζει τα αποτελέσματά μας. Άρα η παρατηρούμενη τυπική απόκλιση του WR οφείλεται στον ορισμό της συστροφής μίας εικόνας.

Στην Εικόνα 3.20 φαίνεται η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SL για τις αρχικές, μειωμένες, ανοικτές και κλειστές αλυσίδες. Παρατηρούμε ότι οι κατανομές είναι παρόμοιες για τις ανοικτές και τις αντίστοιχες κλειστές αλυσίδες. Η διαφορά γίνεται σημαντική μόνο όταν συγκρίνουμε τα αρχικά με τα μειωμένα συστήματα. Πράγματι, στην περίπτωση των κλειστών αλυσίδων προσθέτουμε την συμβολή μίας μόνο ακμής. Περιμένουμε οι αποκλίσεις να είναι παρόμοιες με αυτές που είδαμε στην μελέτη του LK στην προηγούμενη παράγραφο. Σε αυτή την περίπτωση η διαφορά είναι μικρότερη λόγω του μεγάλου θορύβου που εισάγεται στα δεδομένα από τις μεγάλες τιμές της στρέψης σε σχέση με την συστροφή και την περιέλιξη των αλυσίδων.

Η Εικόνα 3.21 δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LKS για τα αρχικά, τα μειωμένα, τα ανοικτά και τα κλειστά συστήματα. Παρατηρούμε ότι η αυξητικές τάσεις είναι παρόμοιες με του LK . Οι κατανομές των αρχικών και των μειωμένων συστημάτων είναι παρόμοιες. Μία μικρή απόκλιση παρατηρείται μεταξύ των ανοικτών και των αντίστοιχων κλειστών συστημάτων. Άρα παρατηρούμε ότι αυτό το μέτρο αυτο-διαπλοκής είναι συγκρίσιμο με



Σχήμα 3.20: Η Εικόνα A δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SL για τα αρχικά και τα μειωμένα συστήματα μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CRETA και η Εικόνα B δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SL για τις αρχικές κλειστές και τις μειωμένες κλειστές αλυσίδες. Η Εικόνα C δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SL για τις αρχικές αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο και η Εικόνα D δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SL για τις μειωμένες αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο.

τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης LK , που συζητήσαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Υπενθυμίζουμε ότι στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων ο LKS είναι ένας άρτιος αριθμός. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα το επιβεβαιώνουν.

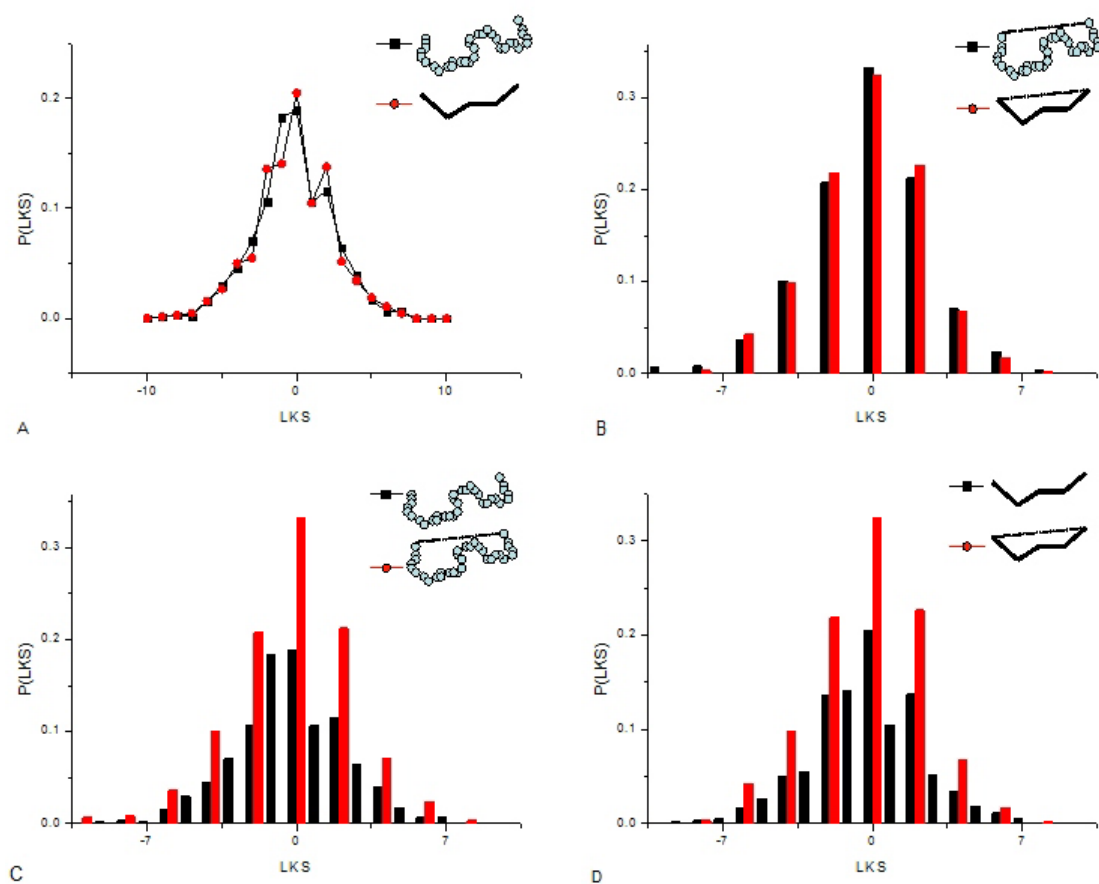
Η Εικόνα 3.22 δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του sl για τις αρχικές, μειωμένες, ανοικτές και κλειστές αλυσίδες. Παρατηρούμε ότι οι κατανομές είναι παρόμοιες για τις ανοικτές και κλειστές αλυσίδες. Η διαφορά γίνεται σημαντική μόνο μεταξύ των αρχικών και των μειωμένων αλυσίδων. Η διαφορά φαίνεται να είναι ακόμα μικρότερη από αυτή που παρατηρήθηκε στην μελέτη του LK λόγω της μεγάλης τιμής της ολικής στρέψης μίας αλυσίδας.

Στην Εικόνα 3.23 βλέπουμε την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του WR για τις αλυσίδες πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA και πριν και μετά το κλείσιμο. Πάλι παρατηρούμε ότι το WR είναι σχεδόν το ίδιο για τα αρχικά και τα μειωμένα συστήματα. Επίσης παρατηρούμε ότι το WR των κλειστών αλυσίδων αποκλίνει περισσότερο από αυτό των ανοικτών. Βλέπουμε ότι η διαφορά μεταξύ των ανοικτών και των κλειστών συστημάτων είναι πολύ παρόμοια με αυτή που παρατηρήσαμε στην μελέτη του LK , αφού τα δεδομένα δεν επηρεάζονται από τον υπολογισμό της ολικής στρέψης των αλυσίδων.

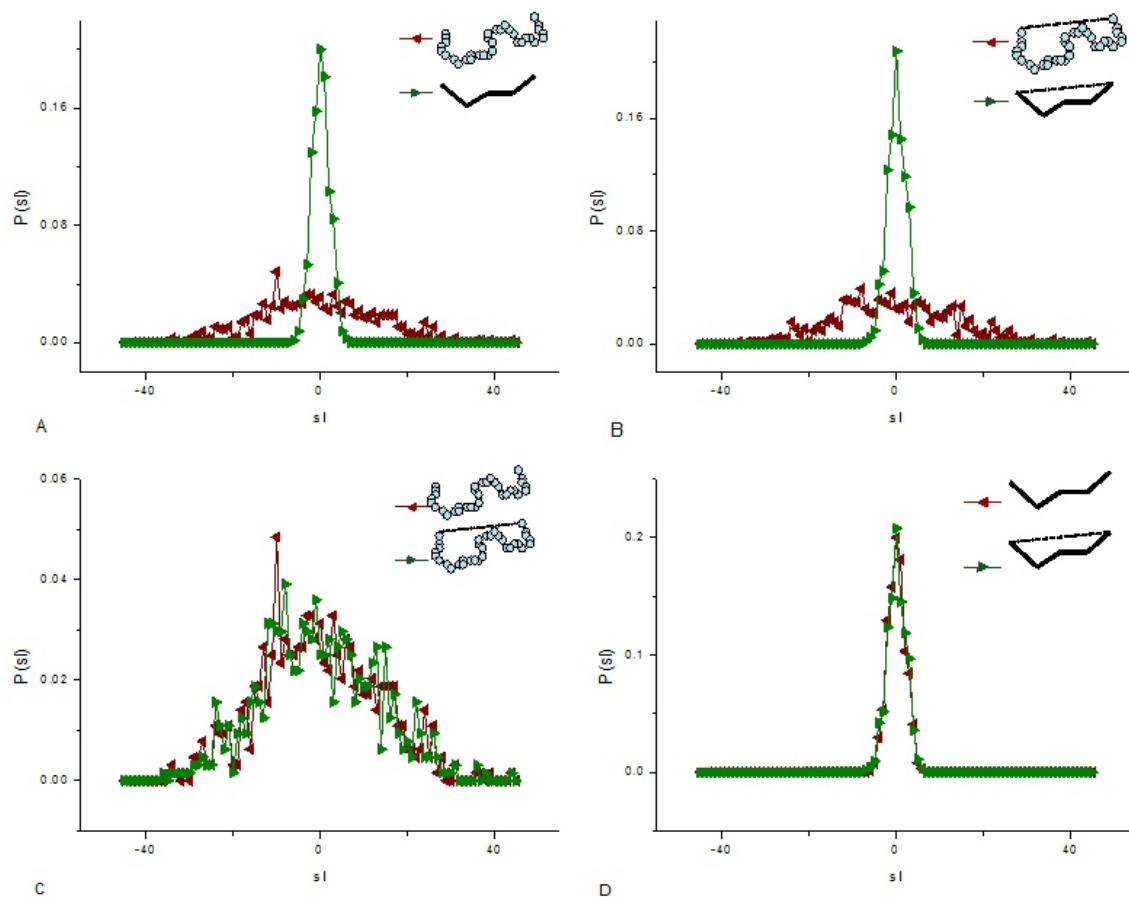
3.6.4 Ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης κελιού τηγμάτων πολυαιθυλενίου

Σε αυτή την παράγραφο υπολογίζουμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης καλίου. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα στις προηγούμενες παραγράφους υποδεικνύουν ότι η περιέλιξης μεταξύ των αρχικών και των μειωμένων αλυσίδων είναι σχεδόν η ίδια για τα δύο συστήματα, άρα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τα μειωμένα συστήματα για τους υπολογισμούς μας. Η Εικόνα 3.24A δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LK και του LK_C για ένα δείγμα 54 τηγμάτων. Παρατηρούμε μία έντονη ομοιότητα μεταξύ των δύο. Υπενθυμίζουμε ότι για ένα τυχαίο ζεύγος, οι δύο τιμές, LK και LK_C δεν ταυτίζονται. Σε αυτή την κατανομή οι τιμές χωρίζονται σε μοναδιαία διαστήματα. Αυτό υποδεικνύει ότι οι αποκλίσεις είναι μικρότερες από ένα, που είναι η προσεγγιστική τιμή ενός τοπολογικού εμποδίου. Δηλαδή, τα δύο μέτρα λαμβάνουν υπόψη το ίδιο πλήθος τοπικών εμποδίων. Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων τα αριθμητικά μας αποτελέσματα δείχνουν ότι τα δύο μέτρα ταυτίζονται. Άρα στην πράξη το LK είναι τοπολογική αναλλοίωτη κλειστών αλυσίδων.

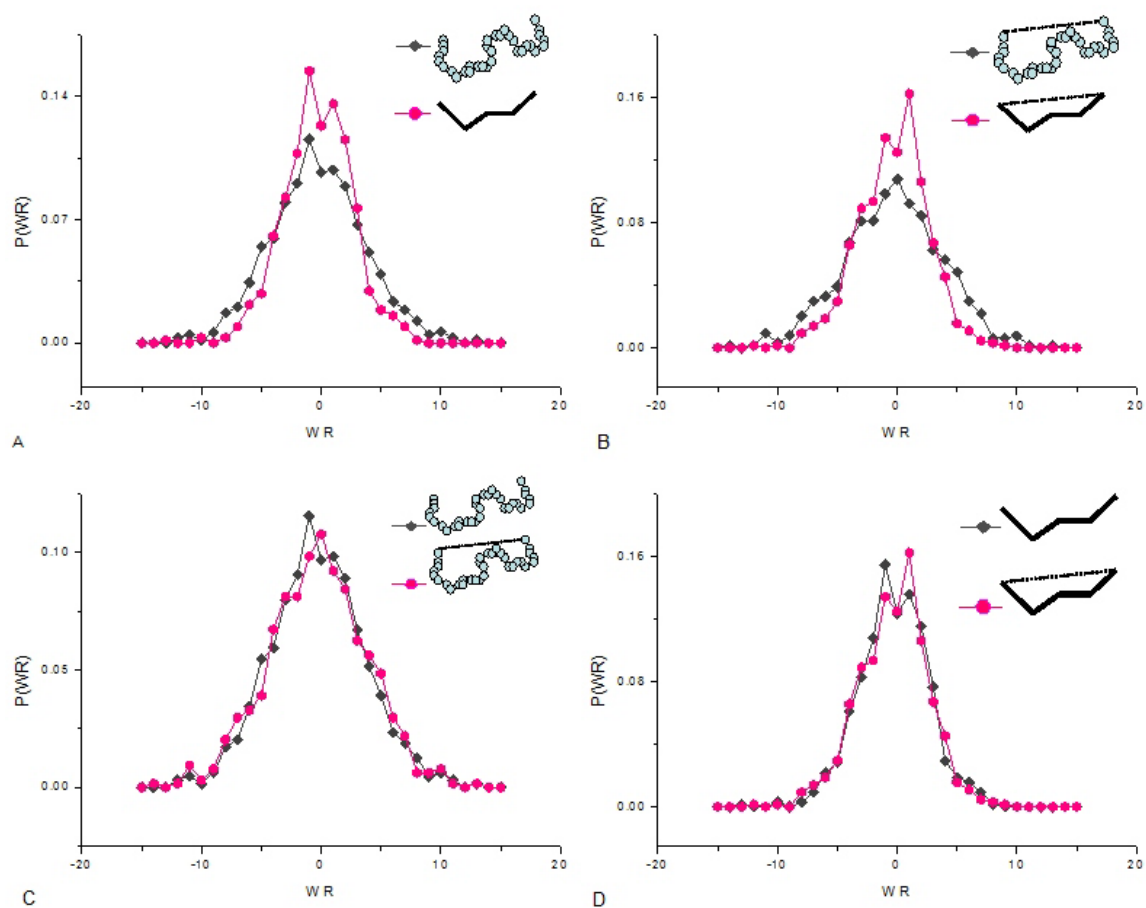
Στη συνέχεια συγκρίνουμε τα LK και LK_C με το LK_P . Πιο συγκεκριμένα, για ένα ζεύγος αλυσίδων υπολογίζουμε το LK_C καθώς μεγαλώνουμε το μέγεθος του κελιού έως και 10 φορές αυτό του αρχικού. Συμβολίζουμε LK_{kC} τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού για ένα κελί k φορές μεγαλύτερο του αρχικού. Η Εικόνα 3.24B δείχνει το $|LK - LK_{kC}|/|LK_{kC}|$ και το $|LK_C - LK_{kC}|/|LK_{kC}|$ για $k = 1, \dots, 10$. Παρατηρούμε ότι για



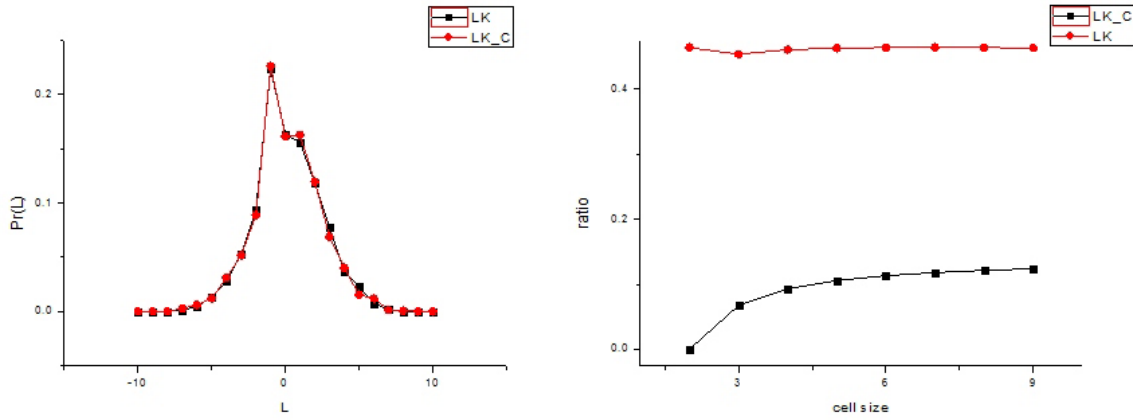
Σχήμα 3.21: Η Εικόνα Α δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LKS για τις αρχικές και τις μειωμένες αλυσίδες μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA και η Εικόνα Β την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LKS για τις αρχικές κλειστές και τις μειωμένες κλειστές αλυσίδες. Η Εικόνα C δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του SI για τις αρχικές αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο και η Εικόνα D δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή του LKS για τις μειωμένες αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο.



Σχήμα 3.22: Η Εικόνα A δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του Sl για τις αρχικές και τις μειωμένες αλυσίδες μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA και η Εικόνα B την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του Sl για τις αρχικές κλειστές και μειωμένες κλειστές αλυσίδες. Η Εικόνα C δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του Sl για τις αρχικές αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο και η Εικόνα D δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του Sl για τις μειωμένες αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο.



Σχήμα 3.23: Η Εικόνα Α δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του WR για τις αρχικές αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο και η Εικόνα Β την κατανομή πιθανότητας των αντίστοιχων διαφορών. Η Εικόνα C δείχνει την κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του WR για τις μειωμένες αλυσίδες πριν και μετά το κλείσιμο και η Εικόνα D δείχνει τις αντίστοιχες διαφορές



Σχήμα 3.24: Α. Η κανονικοποιημένη κατανομή πιθανότητας του LK και του LK_C . Β. Τα $|LK - LK_{kC}|/|LK_{kC}|$ και $|LK_C - LK_{kC}|/|LK_{kC}|$, $k = 1, \dots, 10$.

$k = 1$, $|LK - LK_{kC}|/|LK_{kC}| \approx 0.45$ δηλαδή είναι σχεδόν $LK = \frac{LK_C}{2}$. Για $k \geq 2$, τότε το $|LK - LK_{kC}|/|LK_{kC}|$ μένει σταθερό στο 0.45 και το $|LK_C - LK_{kC}|/|LK_{kC}|$ τείνει στο 0.1, δηλαδή $LK_C \approx \frac{9LK_{kC}}{10}$. Αυτό δείχνει ότι το LK_C είναι μία καλή προσέγγιση του LK_{kC} , το οποίο σημαίνει ότι είναι μία καλή προσέγγιση του LK_P .

3.7 Συμπεράσματα

Τα συστήματα με ΠΣΣ χρησιμοποιούνται συχνά στις εφαρμογές και πιο συγκεκριμένα στην προσομοίωση πολυμερικών τμημάτων. Σε αυτό το κεφάλαιο βάλουμε την βάση για την μελέτη της διαπλοκής σε συστήματα με ΠΣΣ. Ορίσαμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης, LK_P , και δείξαμε ότι στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη που ταυτίζεται με τον αριθμό περιέλιξης δύο αλυσίδων στον χώρο ταύτισης. Επεκτείναμε τον ορισμό αυτό και σε ανοικτές αλυσίδες, όπου υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεγάλης κλίμακας και αποδείξαμε ότι ο LK_P συγκλίνει στην περίπτωση συστημάτων με μία, δύο ή τρεις ΠΣΣ αντίστοιχα (Θεωρήματα 3.3.1, 3.3.7 και 3.3.16). Ομοίως, ορίσαμε μέτρα αυτο-διαπλοκής σε συστήματα με ΠΣΣ, τον περιοδικό αριθμό αυτο-περιέλιξης, τον περιοδικό αριθμό συστροφής και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων.

Για την εφαρμογή σε φυσικά συστήματα όπου οι αλληλεπιδράσεις μικρής κλίμακας μπορεί να έχουν μεγαλύτερο ενδιαφέρον, ορίσαμε δύο περιορισμούς του περιοδικού αριθμού περιέλιξης, τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης, LK , και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού, LK_C , και μελετήσαμε τις ιδιότητές τους. Εφαρμόσαμε αυτά τα μεγέθη σε δείγματα πολυαιθυλενίου

και τα αριθμητικά μας αποτελέσματα έδειξαν ότι ο LK μπορεί να μετρήσει την διαπλοκή σε ένα σύστημα με ΠΣΣ. Εφαρμόζοντας τον LK και συγκρίνοντας τις κατανομές της περιέλιξης πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA δείξαμε ότι ο CReTA διατηρεί την πληροφορία περιέλιξης, και ότι το LK ανακλά τις τοπολογικές διαφορές μεταξύ των ανοικτών και κλειστών συστημάτων. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα επίσης έδειξαν ότι η μέθοδος του από άκρο εις άκρο κλεισίματος των αλυσίδων είναι πολύ ευαίσθητη στην κίνηση των αλυσίδων, ακόμα και αν τα τοπικά εμπόδια διατηρούνται. Αυτό δείχνει ότι ο τοπικός περιοδικός αριθμός περιέλιξης μπορεί να είναι ένα πιο δυνατό μέτρο διαπλοκής ανοικτών αλυσίδων. Ομοίως ορίσαμε και μελετήσαμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό αυτο-περιέλιξης, SL , την τοπική περιοδική συστροφή, WR και τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων, LKS . Τέλος υπολογίσαμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού για διαφορετικά μεγέθη κελιού και τα αριθμητικά μας αποτελέσματα έδειξαν ότι ο LK_C παρέχει μία καλή προσέγγιση του LK_P . Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα έδειξαν ότι ο LK έχει μία μεγαλύτερη απόκλιση από τον LK_P , όμως τα τοπικά εμπόδια που μετρών οι LK και LK_C είναι παρόμοια.

Κεφάλαιο 4

Πίνακας Περιέλιξης

Σε αυτό το κεφάλαιο χρησιμοποιούμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης για να ορίσουμε ένα μέτρο διαπλοκής για ολόκληρο το τήγμα πολυμερούς, τον *περιοδικό πίνακα περιέλιξης*. Μελετάμε τις ιδιότητές του και την εξάρτησή του από το μέγεθος του κελιού προσομοίωσης (Θεώρημα 4.1.28, Θεώρημα 4.1.30). Για να λάβουμε περαιτέρω πληροφορία για την διαπλοκή του συστήματος από τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης, τον συσχετίζουμε με ένα γράφημα και χρησιμοποιούμε εργαλεία της θεωρίας γραφημάτων για να μελετήσουμε την ομοιογένεια της διαπλοκής σε ένα τήγμα. Υπολογίζουμε τους πίνακες περιέλιξης διαφόρων συστημάτων τυχαίων περιπάτων για να ελέγξουμε αν ο πίνακας περιέλιξης μπορεί να διακρίνει τα μή ομοιογενή συστήματα.

Μία χρήσιμη περιγραφή των πολύπλοκων ιδιοτήτων ιξώδους των πολυμερών επιτυγχάνεται με το μοντέλο σωλήνα. Με αυτό το μοντέλο, το πρόβλημα πολλών σωμάτων της κίνησης μίας αλυσίδας που είναι πεπλεγμένη με άλλες σε ένα τήγμα ανάγεται στην μελέτη μίας μοναδικής αλυσίδας σε έναν σωλήνα που αναπαριστά τους περιορισμούς που επιβάλλουν οι διαπλοκές με τις άλλες αλυσίδες. Ο σωλήνας αντικαθιστά τις αλληλεπιδράσεις με τις άλλες αλυσίδες, θεωρώντας ότι η αλυσίδα κινείται ανάμεσα σε μία συλλογή από σταθερά εμπόδια. Αυτό είναι μία προσέγγιση, αφού όλες οι αλυσίδες επιτρέπεται να κινούνται την ίδια στιγμή, άρα τα τοπολογικά εμπόδια δεν είναι σταθερά στον χώρο [133, 124, 96]. Βελτιώσεις στην θεωρία έγιναν λαμβάνοντας υπόψη επιπλέον φαινόμενα και μηχανισμούς που υπάρχουν στα πραγματικά συστήματα αλλά αγνοήθηκαν στην αρχή. Δύο σημαντικοί μηχανισμοί που υπάρχουν στις μοντέρνες θεωρίες σωλήνα είναι οι διακυμάνσεις μήκους (CLFs) και οι εξαφανίσεις εμποδίων (CR) που συμβαίνουν λόγω της κίνησης των γύρω αλυσίδων [96]. Κατά μία έννοια, αυτές οι μελέτες τονίζουν την ιδέα ότι η διαπλοκή των πολυμερικών αλυσίδων είναι ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων.

Ιδανικά, κανείς θα ήθελε να μπορεί να χαρακτηρίσει την διαπλοκή ενός πολυμερικού συστήματος σε μία κατάσταση με μία μόνο μεταβλητή, που λαμβάνει υπόψη την ολική διαμόρφωση

του τήγματος [133]. Συνήθως, για την μέτρηση της διαπλοκής, μέτρα αυτο-διαπλοκής μίας αλυσίδας, ή το πλήθος των τοπολογικών εμποδίων ανά αλυσίδα, υπολογίζουν μία μέση τιμή σε ένα δείγμα, η οποία χρησιμοποιείται για να χαρακτηρίσει την διαπλοκή ενός συστήματος. Η διαπλοκή έτσι αντιμετωπίζεται κατά κάποιον τρόπο σαν πρόβλημα ενός σώματος και έμμεσα σαν ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων. Αυτό όμως δεν λαμβάνει υπόψη την πιο πολύπλοκη διαπλοκή που παράγουν όλες οι συνιστώσες ενός τήγματος μαζί.

Σε αυτό το κεφάλαιο θα χρησιμοποιήσουμε τον αριθμό περιέλιξης για να ορίσουμε ένα μέτρο διαπλοκής για ολόκληρο το σύστημα των αλυσίδων που διαμορφώνουν το τήγμα: Ορίζουμε τον πίνακα περιέλιξης, LM , μίας συλλογής αλυσίδων, έστω I, J, \dots, W , να είναι ο πίνακας με στοιχεία $a_{ij} = L(I, J)$ εάν $i \neq j$ ή $a_{ii} = SL(I)$, κλπ. Αφού ο αριθμός περιέλιξης είναι συμμετρικός, αυτός είναι προφανώς ένας συμμετρικός πίνακας. Ο πίνακας περιέλιξης λαμβάνει υπόψη την όλη την ανά ζεύγη πληροφορία περιέλιξης του τήγματος, καθώς και την αυτο-περιέλιξη κάθε αλυσίδας. Όπως είπαμε και στα προηγούμενα κεφάλαια, ο αριθμός περιέλιξης είναι μία ασθενής αναλλοίωτη, αλλά έχει φυσική ερμηνεία και μπορεί να εφαρμοσθεί φυσικά σε ανοικτές αλυσίδες. Επιπλέον, στην περίπτωση ανοικτών αλυσίδων, το ολοκλήρωμα περιέλιξης εξαρτάται από την απόσταση των αλυσίδων, που είναι ένα χαρακτηριστικό της διαπλοκής των πολυμερών και επίσης είναι μία συνεχής συνάρτηση στο χώρο των διαμορφώσεων.

Ο πίνακας περιέλιξης έχει επίσης τις παραπάνω ιδιότητες, είναι ένας πραγματικός συμμετρικός πίνακας και οι ιδιοτιμές του είναι πραγματικοί αριθμοί. Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων, αυτές είναι αναλλοίωτες υπό συνεχείς κινήσεις των αλυσίδων. Προτείνουμε να χρησιμοποιήσουμε τα χαρακτηριστικά ποσά του πίνακα περιέλιξης για να τα συσχετίσουμε με την διαπλοκή των πολυμερών.

4.1 Περιοδικός Πίνακας Περιέλιξης

Όπως εξηγήσαμε στο Κεφάλαιο 3, είναι κατάλληλο να μελετάμε την διαπλοκή σε ένα σύστημα με ΠΣΣ που παράγεται από ένα κελί C , ανάγοντάς το στην διαπλοκή των γεννητόρων αλυσίδων μέσα στο κελί. Δοθέντος ενός κελιού C που παράγει το περιοδικό σύστημα, ορίζουμε τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης, LM_C , ως τον πίνακα με στοιχεία $a_{ij} = LK_P(I, J)$ εάν $i \neq j$ και $a_{ii} = SL_P(I)$. Για ένα σύστημα που προσομοιώνεται από ένα κελί με n γεννήτορες αλυσίδες, ο LM_C έχει μέγεθος $n \times n$. Άρα ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης μας επιτρέπει να ανάγουμε την μελέτη της διαπλοκής μίας άπειρης συλλογής αλυσίδων που αποτελούν το περιοδικό σύστημα, στην μελέτη ενός πίνακα πεπερασμένης διάστασης. Ο στόχος μας είναι να εξάγουμε από τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης μίας ποσότητα που να χαρακτηρίζει το περιοδικό σύστημα.

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας περιέλιξης εξαρτάται από το μέγεθος του κελιού προσομοίωσης. Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα ένα κελί C που αποτελείται από n γεννήτορες αλυσίδες, και

έστω LM_C ο αντίστοιχος περιοδικός πίνακας περιέλιξης μεγέθους $n \times n$. Στη συνέχεια, έστω $C' = kC$ το κελί που δημιουργείται κολλώντας k αντίγραφα του C σύμφωνα με τις ΠΣΣ. Τότε ισχύει το παρακάτω:

Λήμμα 4.1.1. *Εάν το κελί C έχει n γεννήτορες αλυσίδες, τότε το κελί $C' = mC$ που παράγεται κολλώντας m αντίγραφα του C σύμφωνα με τις ΠΣΣ, έχει mn γεννήτορες αλυσίδες.*

Απόδειξη. Έστω i_1, i_2, \dots, i_w τα τόξα της γεννητόρου αλυσίδας i στο C . Έστω επίσης C_1 ένα άλλο κελί στο περιοδικό σύστημα τέτοιο ώστε $C_1 \in mC$. Τότε υπάρχει ένα διάνυσμα $\vec{v}_1 = (k_1, k_2, k_3)$, $k_1, k_2, k_3 < k$ τέτοιο ώστε $C_1 = C + L_C \vec{v}_1 \in mC$, όπου L_C είναι το μήκος του κελιού C . Τότε υπάρχει μία μεταφορά του i_1 στο C_1 : $i_1 + L_C \vec{v}_1 \in C_1$. Όμως, εξ ορισμού του νέου κελιού $C' = mC$, μήκους $L_{mC} = mL_C$, οι μεταφορές του i_1 στο περιοδικό σύστημα που παράγεται από το C' εκφράζονται σαν $i_1 + L_{C'} \vec{v} = i_1 + mL_C \vec{v}$. Οι μεταφορές του τόξου $i_1 + L_C \vec{v}_1$ στο mC εκφράζονται ως $i_1 + L_C \vec{v}_1 + mL_C \vec{v}$. Άρα δεν μπορεί ποτέ να είναι $i_1 + mL_C \vec{v} = i_1 + L_C(m+1)\vec{v}$ για \vec{v}, \vec{v}' , με συντεταγμένες στο \mathbb{Z} . Άρα το τόξο $i_1 + L_C \vec{v}_1$ ανήκει σε μία άλλη γεννήτορα αλυσίδα του C' . Αυτό ισχύει για κάθε μεταφορά του i_1 μέσα στο C' . Αφού το C' αποτελείται από m κελιά C , τότε το C' ορίζει mn γεννήτορες αλυσίδες. \square

Παρατήρηση 4.1.2. Ομοίως, εάν το κελί C έχει n ελεύθερες αλυσίδες, τότε το κελί $C' = mC$ που δημιουργείται κολλώντας m αντίγραφα του C σύμφωνα με τις ΠΣΣ, έχει mn ελεύθερες αλυσίδες.

Άρα ο αντίστοιχος περιοδικός πίνακας περιέλιξης, $LM_{C'}$ έχει μέγεθος $mn \times mn$. Πράγματι, τα κελιά C και C' περιγράφουν διαφορετικά τοπολογικά αντικείμενα. Εάν ταυτίσουμε τις έδρες του κελιού, τότε θα πάρουμε έναν κρίκο n -συνιστωσών σε μία 3-πολλαπλότητα στην πρώτη περίπτωση και έναν κρίκο mn -συνιστωσών στην δεύτερη περίπτωση. Άρα παρατηρούμε ότι οι περιοδικοί πίνακες περιέλιξης LM_C και $LM_{C'}$ είναι διαφορετικοί, όμως το περιοδικό σύστημα που παράγουν τα κελιά και των οποίων την διαπλοκή θέλουμε να μελετήσουμε, είναι τα ίδια. Άρα, υπάρχει τοπολογική πληροφορία που δεν μας είναι χρήσιμη για αυτήν την μελέτη και την οποία θα θέλαμε να διαχωρίσουμε. Για αυτόν τον λόγο, θα μελετήσουμε την εξάρτηση του περιοδικού πίνακα περιέλιξης από το μέγεθος του κελιού και θα αναζητήσουμε ποσότητες που παραμένουν αναλλοίωτες από το μέγεθος του κελιού.

Στις επόμενες παραγράφους, θα αποδείξουμε ότι κάποιες από τις ιδιοτιμές του περιοδικού πίνακα περιέλιξης είναι ανεξάρτητες από το μέγεθος του κελιού. Πρώτα θα μελετήσουμε την απλούστερη περίπτωση του περιοδικού πίνακα περιέλιξης ενός κελιού με μία ΠΣΣ. Αυτή η περίπτωση θα απλοποιήσει την κατανόηση της γενικότερης περίπτωσης δύο και τριών ΠΣΣ.

Παρατήρηση 4.1.3. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα στην Παράγραφο 3.6.3 υποδεικνύουν ότι η ολική στρέψη που περιέχεται στον περιοδικό αριθμό αυτο-περιέλιξης δίνει θύροβο δτα

δεδομένα και βάζει πολύ βάρος στα διαγώνια στοιχεία του πίνακα. Για αυτόν τον λόγο, κανείς μπορεί να θέλει να αγνοήσει την ολική στρέψη των αλυσίδων και να χρησιμοποιήσει την περιοδική στροφορμή ή τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων για τα διαγώνια στοιχεία. Για την εφαρμογή στα πολυμερή μπορεί κανείς να θέλει να χρησιμοποιήσει τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης, τοπικό αριθμό αυτο-περιέλιξης κλπ για να ορίσει έναν τοπικό περιοδικό πίνακα περιέλιξης, που λαμβάνει υπόψη όλα τα τοπικά εμπόδια των αλυσίδων.

4.1.1 Συστήματα με μία ΠΣΣ

Σε αυτή την παράγραφο θα θεωρήσουμε συστήματα με μία ΠΣΣ. Αυτή η κατάσταση συναντάται συχνά στην προσομοίωση πολυμερών σε περιορισμένο χώρο.

Παρατηρούμε ότι ενώνοντας m κελιά παίρνουμε ένα μεγαλύτερο κελί που συμβολίζουμε mC , το οποίο εφαρμόζει ΠΣΣ στις αλυσίδες που ακουμπάν τις έδρες του στην x -κατεύθυνση. Μπορούμε να ενώσουμε κελιά του τύπου mC κολλώντας τις x -έδρες τους σύμφωνα με τις ΠΣΣ για να φτιάξουμε το ίδιο περιοδικό σύστημα όπως το κελί C . Άρα το mC είναι ένα άλλο κελί για το ίδιο περιοδικό σύστημα. Χωρίς βλάβη της γενικότητας σε μία ΠΣΣ θα ενώνουμε κελιά πάντα προς την θετική κατεύθυνση του x -άξονα. Ας συμβολίσουμε τα κελιά που αποτελούν το mC ως εξής: $C_j = C_0 + (j, 0, 0)$, όπου $C_0 = C$. Από το Λήμμα 4.1.1 υπάρχουν m γεννήτορες αλυσίδες στο κελί mC . Έστω $i^{(0)}$ η γεννήτορας αλυσίδα το σημείο βάσης της οποίας κείται στο κελί C_0 . Ονομάζουμε τις γεννήτορες αλυσίδες σύμφωνα με την θέση των σημείων βάσης τους σε σχέση με το σημείο βάσης της $i^{(0)}$.

Το παρακάτω αποτέλεσμα θα μας φανεί χρήσιμο στη συνέχεια:

Λήμμα 4.1.4. *Εάν μία εικόνα μίας ελεύθερης αλυσίδας I τέμνει k κελιά C , τότε υπάρχουν k εικόνες της I που τέμνουν ένα κελί C .*

Απόδειξη. Έστω C_1, \dots, C_k τα κελιά που τέμνει μία εικόνα της I , έστω I_1 . Συμβολίζουμε C , και ονομάζουμε *κεντρικό κελί*, το κελί στο οποίο κείται το σημείο βάσης της I_1 . Τότε τα κελιά C_1, \dots, C_k καθορίζονται από ένα πλήθος διανυσμάτων $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_k$ που συμβολίζουν τις θέσεις του αντίστοιχου κελιού C_i σε σχέση με το κεντρικό κελί. Έστω i_w ένα τόξο της I_1 που κείται στο κελί C_w , που ορίζεται από το διάνυσμα \vec{v}_w . Τότε ας μεταφέρουμε την I_1 κατά $-\vec{v}_w$. Αυτό δίνει μία άλλη εικόνα της I , έστω I_w . Το τόξο $i_w - \vec{v}_w$ ανήκει στην I_w και κείται στο κεντρικό κελί. Άρα η I_w τέμνει το C . Κάθε άλλο τόξο της I_1 στο C_w μεταφέρεται στο C και ανήκει στο I_w . Άρα, τουλάχιστον οι παρακάτω εικόνες τέμνουν το C : $I_1 - \vec{v}_1, \dots, I_1 - \vec{v}_k$. Ας υποθέσουμε ότι υπάρχει μία άλλη εικόνα της I , έστω I_n που τέμνει το C . Έστω i_n ένα τόξο της I_n στο C . Τότε υποθέτουμε ότι το σημείο βάσης της I_n κείται μέσα στο κελί $C - \vec{v}_n$. Αφού η I_n είναι μία εικόνα της I , θα είναι $I_n = I_1 - \vec{v}_n$. Άρα, το τόξο $i_n - \vec{v}_n$ ανήκει στην I_1 και κείται μέσα στο κελί $C_n = C + \vec{v}_n$. □

Λήμμα 4.1.5. Έστω I μία ελεύθερη αλυσίδα σε ένα σύστημα με μία ΠΣΣ που παράγεται από το κελί C . Ας υποθέσουμε ότι το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας εικόνας της I αποτελείται από k κελιά. Έστω mC το νέο κελί που δημιουργείται κολλώντας m αντίγραφα του C , όπου $m = ak + b$, $b < k$ και $a \in \mathbb{N}$. Τότε υπάρχουν m ελεύθερες αλυσίδες στο mC , έτσι ώστε για $((a - 1)k + b + 1) = c$ οι εικόνες τους δεν ακουμπούν το σύνορο του mC , και είναι $k - 1$ τα οποία έχουν δύο εικόνες που τέμνουν το mC .

Απόδειξη. Ας θεωρήσουμε το μικρότερο τετράεδρο που δημιουργείται κολλώντας αντίγραφα του C , που περιέχει μία εικόνα στης I . (Στην περίπτωση ενός κελιού με μία ΠΣΣ, αυτό το τετράεδρο θα ταυτίζεται με το ελαχιστικό ξεδίπλωμα της I .) Εάν $m = k$ τότε μόνο ένα τετράεδρο μεγέθους k μπορεί να διαμορφωθεί, ακριβώς το kC , άρα υπάρχει μόνο μία ελεύθερη αλυσίδα της οποίας η εικόνα ξεδιπλώνεται στο kC . Άρα για $m = k$ η σχέση $((a - 1)k + b + 1) = c$ ισχύει. Θα αποδείξουμε με επαγωγή ότι ισχύει για κάθε m .

Ας υποθέσουμε ότι ισχύει για m κελιά και ας υποθέσουμε ότι κολλάμε ακόμα ένα κελί στα δεξιά, έτσι ώστε $m + 1 = ak + b + 1$. Τότε το τετράεδρο μεγέθους $m + 1$ που ξεκινά από το κελί $C_{(m+1-k+1)}$ είναι το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας άλλης εικόνας της I , δηλαδή, μίας άλλης ελεύθερης αλυσίδας στο $(m + 1)C$.

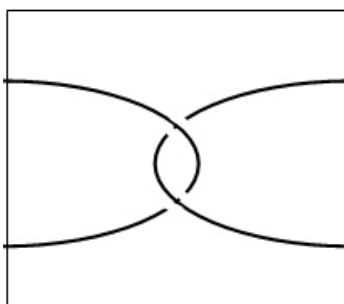
Άρα οι υπόλοιπες $m + 1 - c + 1 = m - c$ ελεύθερες αλυσίδες είναι τέτοιες ώστε οι πρωταρχικές τους εικόνες αγγίζουν τις έδρες του $(m + 1)C$. Έστω I μία από αυτές τις ελεύθερες αλυσίδες. Αφού $mu(I) < m$, κάθε εικόνα μίας ελεύθερης αλυσίδας που ακουμπάει το σύνορο $(m + 1)C$ ξεδιπλώνεται σε δύο αντίγραφα του $(m + 1)C$. Τότε από το Λήμμα 4.1.4, υπάρχουν ακριβώς δύο αντίγραφα της I που τέμνουν το $(m + 1)C$.

□

4.1.1.1 Μία κλειστή αλυσίδα σε ένα κελί με μία ΠΣΣ

Ξεκινάμε με ένα παράδειγμα που ευνοεί την κατανόηση των προηγούμενων ορισμών και δείχνει τις ιδιότητες του πίνακα περιέλιξης. Στη συνέχεια θα επικεντρωθούμε στην γενική περίπτωση μίας αλυσίδας σε ένα σύστημα με μία ΠΣΣ.

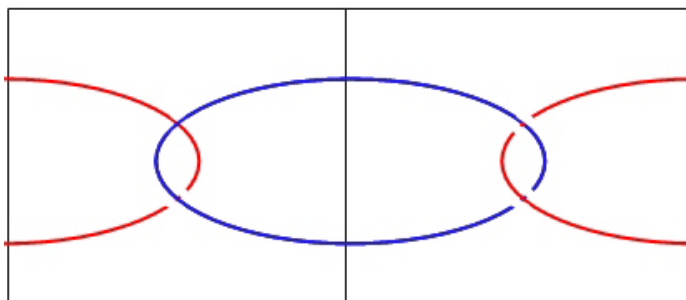
Παράδειγμα 1[Ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης του κελιού της Εικόνας 4.1]: Παρατηρούμε ότι το κελί που φαίνεται στην Εικόνα 4.1 αποτελείται από μόνο μία ελεύθερη κλειστή αλυσίδα, έστω I , σε ένα σύστημα με μία ΠΣΣ έτσι ώστε η αλυσίδα να ξεδιπλώνεται σε δύο κελιά. Υπάρχουν δύο εικόνες της I , έστω I_2 και I_3 που τέμνουν το ελαχιστικό ξεδίπλωμα μίας εικόνας, I_1 της I . Ο αριθμός αυτο-περιέλιξης μίας εικόνας της I είναι 0.



Σχήμα 4.1: Το κελί C αποτελείται από μία γεννήτορα αλυσίδα, έστω i , στην οποία επιβάλλει μία ΠΣΣ. Υπάρχουν δύο εικόνες της I , έστω I_1, I_2 που τέμνουν το C .

Για αυτό το κελί, έστω C , ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης έχει μέγεθος 1×1 και ισούται με τον περιοδικό αριθμό αυτο-περιέλιξης της I . Δηλαδή,

$$LM_C = SL_P(I) = Sl(I_1) + L(I_1, I_2) + L(I_1, I_3) = 0 + 1 + 1 = 2 \quad (4.1)$$



Σχήμα 4.2: Το κελί $2C$ περιέχει δύο γεννήτορες αλυσίδες, $i^{(1)}$ (τα μπλέ τόξα) και $i^{(2)}$ (τα κόκκινα τόξα) στα οποία επιβάλλει μία ΠΣΣ.

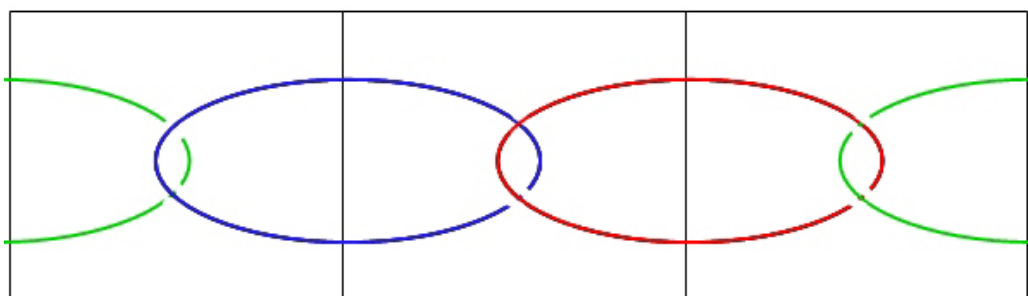
Όταν κολλάμε δύο κελιά C για να φτιάξουμε ένα μεγαλύτερο κελί $2C$, τότε παίρνουμε ένα νέο κελί που περιέχει δύο γεννήτορες αλυσίδες, έστω $i^{(1)}$ και $i^{(2)}$. Αυτές αντιστοιχούν σε δύο ελεύθερες αλυσίδες $I^{(1)}$ και $I^{(2)}$ στο περιοδικό σύστημα. Μία εικόνα της $I^{(1)}$ ξεδιπλώνεται εντελώς στο $2C$, αλλά υπάρχουν δύο εικόνες της $I^{(2)}$ που τέμνουν το $2C$ (δείτε την Εικόνα 4.2). Τότε έχουμε

$$LM_{2C} = \begin{bmatrix} SL_P(I^{(1)}) & LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & SL_P(I^{(2)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Προσθέτοντας την πρώτη κολώνα στην δεύτερη και αφαιρώντας την πρώτη σειρά από την δεύτερη παίρνουμε έναν όμοιο πίνακα:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

με ιδιοτιμές $\lambda_1 = SL_P(I) = 2, \lambda_2 = -2$



Σχήμα 4.3: Το κελί $3C$ περιέχει τρεις γεννήτορες αλυσίδες, $i^{(1)}$ (τα μπλέ τόξα), $i^{(2)}$ (τα κόκκινα τόξα), και $i^{(3)}$ (τα πράσινα τόξα), στα οποία επιβάλλει μία ΠΣΣ.

Για το κελί $3C$ που δημιουργείται μετά την συγκόλληση τριών αντιγράφων του C (δείτε Εικόνα 4.3) έχουμε

$$LM_{3C} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

που είναι όμοιος με τον πίνακα

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

με ιδιοτιμές $\lambda'_1 = \lambda_1 = SL_P(I) = 2$ και $\lambda'_{2,3} = -1$. Παρατηρούμε ότι αυτός ο πίνακας έχει το ίδιο χαρακτηριστικό πολυώνυμο όπως το ευθύ άθροισμα $LM_C \oplus LM_{22}$, όπου

$$LM_{22} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

Για το κελί $4C$ που δημιουργείται μετά από την συγκόλληση τεσσάρων αντιγράφων του C έχουμε

$$LM_{4C} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

που είναι όμοιος με τον πίνακα

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Αυτός ο πίνακας έχει το ίδιο χαρακτηριστικό πολυώνυμο όπως το ευθύ άθροισμα $LM_C \oplus LM_{22}$, όπου

$$LM_{22} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

με ιδιοτιμές $\lambda_1'' = \lambda_1 = SL_P(I)$ και $\lambda_2'' = -2$, $\lambda_{34}'' = 0$.

Παρατήρηση 4.1.6. Παρατηρούμε ότι τα χαρακτηριστικά πολυώνυμα όλων των παραπάνω πινάκων έχουν κοινό παράγοντα το $(\lambda - 2)$. Επίσης, $\lambda_1 = 2$ είναι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή για όλους.

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε την περίπτωση μίας αλυσίδας σε μία ΠΣΣ που ξεδιπλώνεται σε k κελιά. Ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης του συστήματος έχει μέγεθος 1×1 , $LM_C = SL_P(I) = Sl(I_1) + \sum_i L(I_1, I_i)$.

Εάν κολλήσουμε m κελιά για να φτιάξουμε ένα μεγαλύτερο κελί mC , τότε από το Λήμμα 4.1.1 υπάρχουν m γεννήτορες αλυσίδες στο k_1C . Ο πίνακας περιέλιξης αυτού του κελιού έχει μέγεθος $m \times m$ και έχει την παρακάτω μορφή:

$$LM_{mC} = \begin{bmatrix} SL_P(I^{(1)}) & LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & \dots & LK_P(I^{(1)}, I^{(m)}) \\ LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & SL_P(I^{(2)}) & \dots & LK_P(I^{(2)}, I^{(m)}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ LK_P(I^{(1)}, I^{(m)}) & LK_P(I^{(2)}, I^{(m)}) & \dots & SL_P(I^{(m)}) \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Λήμμα 4.1.7. Έστω C ένα κελί με μία ΠΣΣ που αποτελείται μόνο από μία αλυσίδα της οποίας η εικόνα ξεδιπλώνεται σε k κελιά. Έστω mC το κελί που διαμορφώνεται αφού κολλήσουμε m αντίγραφα του C , τότε το άθροισμα όλων των όρων μίας σειράς του LM_{mC} ισούται με $SL_P(I)$, για κάθε m .

Απόδειξη. Ας υπολογίσουμε το ολικό άθροισμα των όρων της πρώτης σειράς:

$$\begin{aligned}
& SL_P(I^{(1)}) + LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) + \dots + LK_P(I^{(1)}, I^{(m)}) \\
&= SL(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + uk_1 L_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&+ \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}(1, 0, 0) + u \cdot mL_{Cb}(1, 0, 0)) + \\
&+ \dots + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, (I_1 + (k_1 - 1)L_{Cb}(1, 0, 0)) + u \cdot mL_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&= SL(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + umL_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&+ \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (1 + um)L_{Cb}(1, 0, 0)) + \\
&+ \dots + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (m - 1 + um)L_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&= SL(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + uL_{Cb}(1, 0, 0)) = SL_P(I)
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned}
& SL_P(I^{(1)}) = SL_P(I^{(2)}) = \dots = SL_P(I^{(m)}) \\
&= SL(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_{mu}) = SL(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + muL(1, 0, 0))
\end{aligned} \tag{4.12}$$

αφού ο $SL(I_1)$ είναι ο ίδιος για κάθε εικόνα I_u , και όλες οι εικόνες $I_i + muL(1, 0, 0)$ και I_i είναι στην ίδια σχετική θέση όπως η $I_1 + muL(1, 0, 0)$ σε σχέση με το I_1 .

Επίσης έχουμε

$$\begin{aligned}
& LK_P(I^{h_1}, I^{h_2}) = \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1}, I^{h_2} + muL(1, 0, 0)) \\
&= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1}, I^{h_1} + ((h_2 - h_1) + mu)L(1, 0, 0))
\end{aligned} \tag{4.13}$$

και

$$\begin{aligned}
LK_P(I^{h'_1}, I^{h'_2}) &= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1}, I^{h'_2} + muL(1, 0, 0)) \\
&= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1}, I^{h'_1} + ((h'_2 - h'_1) + mu)L(1, 0, 0)) \\
&= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1}, I^{h'_1} + ((h_2 - h_1) + mu)L(1, 0, 0))
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Αλλά $I^{h_1}, I^{h_1} + ((h_2 - h_1) + mu)L(1, 0, 0)$ είναι στην ίδια σχετική θέση όπως οι $I^{h'_1}, I^{h'_1} + ((h_2 - h_1) + mu)L(1, 0, 0)$, άρα, $LK_P(I^{h'_1}, I^{h'_2}) = LK_P(I^{h_1}, I^{h_2})$. Άρα, έχουμε $LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) = LK_P(I^{(2)}, I^{(3)})$, κλπ. Δηλαδή, για κάθε $I^{(h'_1)}, I^{(h'_2)}$ τέτοιο ώστε $h'_2 - h'_1 = h_2 - h_1$, είναι

$$LK_P(I^{(h_1)'}, I^{(h_2)'}) = LK_P(I^{(h_1)}, I^{(h_2)}) \tag{4.15}$$

Άρα από την Εξ. 4.12 και την Εξ. 4.15 έχουμε ότι το άθροισμα των στοιχείων κάθε γραμμής είναι $SL_P(I)$.

□

Παρατήρηση 4.1.8. Ακριβώς το ίδιο ισχύει για το άθροισμα των όρων κάθε στήλης.

Παρατήρηση 4.1.9. [Επιπτώσεις του Λήμματος 4.1.7]

(i) Η συνολική περιέλιξη που εφαρμόζεται σε μία αλυσίδα, λόγω της περιέλιξης με τις εικόνες των άλλων αλυσίδων και την περιέλιξη με τις εικόνες του εαυτού της, παραμένει σταθερός και είναι ανεξάρτητος από το μέγεθος του κελιού.

(ii) Το συνολικό άθροισμα των στοιχείων του πίνακα περιέλιξης εξαρτάται γραμμικά από το μέγεθος του κελιού. Έστω $Total(LM_C)$ το συνολικό άθροισμα των στοιχείων του περιοδικού πίνακα περιέλιξης LM_C . Τότε, είναι $Total(LM_{mC}) = mTotal(LM_C) = mSL(I)$.

(iii) Από τις Εξ. 4.12 και 4.15, έπεται ότι ο LM_{mC} είναι ένας συμμετρικός κυκλικός πίνακας. Αυτοί οι πίνακες έχουν ιδιαίτερες ιδιότητες που τους σχετίζουν με μετασχηματισμούς Fourier.

Παρατήρηση 4.1.10. Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων, για ένα αρκετά μεγάλο κελί, ο πίνακας περιέλιξης θα περιέχει μηδενικά στοιχεία. Καθώς το μέγεθος του κελιού αυξάνει το πλήθος των μη μηδενικών στοιχείων μειώνεται, δίνοντας έναν αραιό πίνακα. Μπορούμε να δώσουμε την μορφή αυτού του πίνακα: Εάν συγκολλήσουμε λιγότερα από k κελιά, έστω $m < k$ για να φτιάξουμε ένα μεγαλύτερο κελί mC , τότε καμία από τις εικόνες της I δεν ξεδιπλώνεται στο mC , και όλα τα στοιχεία του πίνακα περιέλιξης μπορεί να είναι μη μηδενικά. Εάν $m \geq k$, τότε παρατηρούμε ότι μία εικόνα μίας ελεύθερης αλυσίδας δεν μπορεί να είναι διαπλεγμένη με καμία από τις μεταφορές της μέσα στο mC , άρα είναι

$$SL_P(I^{(h)}) = sl(I_1) := s, \quad \text{εάν } k < m \quad (4.16)$$

Όμοια είναι

$$LK_P(I^{(h_1)}, I^{(h_2)}) = 0, \quad \text{εάν } |h_2 - h_1| > k \pmod{m} \quad (4.17)$$

και όπως φαίνεται στην απόδειξη του Λήματος 4.1.7, είναι

$$LK_P(I^{(h_1)'}, I^{(h_2)'}) = LK_P(I^{(h_1)}, I^{(h_2)}) := l_{h_1 - h_2}, \quad \text{εάν } h_2' - h_1' = h_2 - h_1 \pmod{m} \quad (4.18)$$

Άρα ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης θα έχει την μορφή:

$$LM_{mC} = \begin{bmatrix} s & l_1 & \dots & l_k & 0 & \dots & 0 & l_k & \dots & l_1 \\ l_1 & s & l_1 & \dots & l_k & 0 & \dots & 0 & \dots & l_2 \\ l_2 & l_1 & s & l_1 & \dots & l_k & 0 & \dots & l_k & \dots \\ \vdots & & & & & & & & & \\ \dots & l_k & \dots & 0 & l_k & \dots & l_1 & s & l_1 & l_2 \\ l_2 & \dots & l_k & \dots & 0 & l_k & \dots & l_1 & s & l_1 \\ l_1 & \dots & l_k & 0 & \dots & 0 & l_k & \dots & l_1 & s \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

που είναι ο πίνακας για τον οποίο τα στοιχεία της i -στής σειράς είναι $l_{ii} = s, l_{i, (i-d) \bmod m} = l_d, l_{i, (i+d) \bmod m} = l_d$ για $d = 1, \dots, k$ ανδ $l_{ij} = 0$ σε κάθε άλλη περίπτωση.

Πρόταση 4.1.11. Θεωρούμε μία ελεύθερη αλυσίδα I στο περιοδικό σύστημα διαμορφώνεται από ένα κελί με μία ΠΣΣ. Υποθέτουμε ότι μία εικόνα της I ξεδιπλώνει σε k κελιά. Τότε ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης L_{mC} του περιοδικού συστήματος που παράγεται από ένα μεγαλύτερο κελί από m συγκολλημένα κελιά, mC έχουμε

$$L_{mCb} = \begin{bmatrix} SL_P(I) & D \\ 0 & E \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

όπου D και E είναι πραγματικοί πίνακες με μεγέθους $1 \times (m-1)$ και $(m-1) \times (m-1)$ αντίστοιχα.

Απόδειξη. Θα δείξουμε ότι αυτός ο πίνακας μπορεί να εκφραστεί στην παρακάτω μορφή:

$$Q^{-1}L_{mCb}Q = \begin{bmatrix} SL_P(I) & C \\ 0 & D \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

όπου Q και Q^{-1} είναι γινόμενα απλών πινάκων, δηλαδή

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & & & & & & & & & \\ 1 & \dots & 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & & & & \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \prod_{1 \leq l \leq m-1} Q^{m-1} \quad (4.22)$$

που είναι ο πίνακας για τον οποίο $[Q]_{ij} = 1$ για $j \leq i$ και $[Q]_{ij} = 0, j > i$, και

$$Q^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & & \\ 0 & \dots & -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} = \prod_{1 \leq l \leq m-1} (Q^{m-l})^{-1} \quad (4.23)$$

που είναι ο πίνακας για τον οποίο $[Q^{-1}]_{ii} = 1$, $[Q^{-1}]_{i,i-1} = -1$ και $[Q^{-1}]_{ij} = 0$ για $j \neq i, i-1$.

Ο πίνακας Q^k είναι της μορφής

$$Q^k = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & & & & & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

του οποίου τα στοιχεία είναι $[Q^k]_{ij} = 1$ για $i = j$ και $[Q^k]_{ij} = 0$ για κάθε $j \neq i$ εκτός του στοιχείου $[Q^k]_{k,k-1} = 1$. Ο πολλαπλασιασμός $LM_{mC}Q^k$ προσθέτει όλα τα στοιχεία της k -στής κολώνας LM_{mC} στα στοιχεία της $(k-1)$ -κολώνας.

Ομοίως, ο πίνακας $(Q^k)^{-1}$ είναι της μορφής

$$(Q^k)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & & & & & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

τα στοιχεία του οποίου είναι $[(Q^k)^{-1}]_{ij} = 1$ για $i = j$ και $[(Q^k)^{-1}]_{ij} = 0$ για κάθε $j \neq i$ εκτός του στοιχείου $[(Q^k)^{-1}]_{k,k-1}^{-1} = -1$. Ο πολλαπλασιασμός $(Q^k)^{-1}LM_{mC}$ κάνει την αφαίρεση όλων των στοιχείων της $(k-1)$ στης σειράς του LM_{mC} από τα στοιχεία της k -σειράς.

Αφού το άθροισμα όλων των στοιχείων μίας σειράς του LM_{mC} ισούται με $SLP(I)$, είναι προφανές ότι πολλαπλασιάζοντας με Q το στοιχείο με δείκτες $(1,1)$ του πίνακα προκύπτει να είναι $SLP(I)$. Αλλά, για να πάρουμε έναν όμοιο πίνακα πρέπει να πολλαπλασιάσουμε επίσης με Q^{-1} .

Το στοιχείο $[LM'_{mC}]_{ij}$ του πίνακα $LM'_{mC} = Q^{-1}LM_{mC}Q$ μπορεί να γραφτεί σαν:

$$\begin{aligned} [LM'_{mC}]_{ij} &= \sum_{1 \leq u \leq m} [Q^{-1}]_{iu} \left[\sum_{1 \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{uv} [Q]_{vj} \right] \\ &= \sum_{1 \leq u \leq m} [Q^{-1}]_{iu} \left[\sum_{j \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{uv} \right] = \sum_{j \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{iv} - \sum_{j \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{i+1,v} \\ &= \sum_{j \leq v \leq m} ([LM_{mC}]_{iv} - [LM_{mC}]_{i+1,v}) \end{aligned} \quad (4.26)$$

όπου παρατηρήσαμε ότι $[Q]_{vj} = 0$ για $v < j$, και $[Q]_{vj} = 1$ για $v \geq j$. Επίσης, είναι $[Q^{-1}]_{iu} = 0$ για κάθε $u \neq i-1, i$ και $[Q]_{i,i-1} = -1, [Q]_{ii} = 1$.

Άρα, από το Λήμμα 4.1.7 για $i > 1, j = 1$, έχουμε:

$$[LM'_{mC}]_{i1} = \sum_{1 \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{iv} - \sum_{1 \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{i+1,v} = SLP(I) - SLP(I) = 0 \quad (4.27)$$

Άρα, ο πίνακας περιέλιξης μπορεί να γραφτεί σαν

$$LM_{mC} \sim LM'_{mC} = \begin{bmatrix} SLP & * & \dots & * & * \\ 0 & * & \dots & * & * \\ \dots & & & & \\ 0 & * & \dots & * & * \\ 0 & * & \dots & * & * \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

□

Παρατηρούμε ότι από το παραπάνω αποτέλεσμα έπεται ότι

Παρατήρηση 4.1.12. (1) το χαρακτηριστικό πολώνυμο του LM_{mC} είναι τέτοιο που $SL_P(I) \oplus E$, όπου E ένας πραγματικός πίνακας μεγέθους $m-1 \times m-1$.

(2) οι ιδιοτιμές του L_C βρίσκονται ανάμεσα στις ιδιοτιμές του L_{mC} .

Παρατήρηση 4.1.13. Έστω $b = \{I^{(1)}, \dots, I^{(m)}\}$ οι αλυσίδες στο κελί mCb . Αυτή είναι η αρχική βάση στην οποία αντιστοιχεί ο πίνακας L_{kCb} . Τότε η νέα βάση του b' μπορεί να εκφραστεί ως προς την παλιά σαν $b' = Q^{-1}bQ$, δηλαδή

$$b' = Q^{-1}bQ = \begin{bmatrix} I^{(m)} \\ I^{(m)} - I^{(1)} \\ I^{(m)} - I^{(2)} \\ \dots \\ I^{(m)} - I^{(m-1)} \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

Παράδειγμα 2[Γενική περίπτωση μίας κλειστής ελεύθερης αλυσίδας σε μία ΠΣΣ που ξεδιπλώνεται σε δύο κελιά]: Για μία ελεύθερη αλυσίδα, έστω I , που ξεδιπλώνεται σε δύο κελιά C , υπάρχουν μόνο δύο εικόνες, I_1 και I_2 , που τέμνουν το C . Για το σύστημα που παράγεται από το C , ο πίνακας περιέλιξης

$$LM_C = SL_P(I) = Sl(I_1) + L(I_1, I_2) \quad (4.30)$$

Εάν συγκολλήσουμε δύο κελιά που διαμορφώνουν ένα κελί $2C$, τότε το νέο κελί παράγει δύο ελεύθερες αλυσίδες, έστω $I^{(1)}$ και $I^{(2)}$ και ο πίνακας περιέλιξης είναι

$$LM_{2C} = \begin{bmatrix} SL_P(I^{(1)}) & LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & SL_P(I^{(2)}) \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

Αφού υπάρχει μόνο μία εικόνα της $I^{(1)}$ σε ένα κελό $2C$, μία εικόνα της $I^{(1)}$ δεν είναι πεπλεγμένη με τις εικόνες της, άρα, είναι $SL_P(I^{(1)}) = Sl(I_1)$. Όμοια, αφού μία εικόνα της $I^{(2)}$ ξεδιπλώνει σε δύο κελιά, τότε είναι αδύνατο να είναι πεπλεγμένη με μία μεταφορά της κατά $2C$, άρα είναι $SL_P(I^{(2)}) = SL_P(I^{(1)}) = Sl(I_1) := s$. Έστω $I_1^{(1)}$ η εικόνα της $I^{(1)}$ στο C και $I_1^{(2)}, I_2^{(2)}$ οι δύο εικόνες της $I^{(2)}$ που τέμνουν το $2C$. Παρατηρούμε ότι οι $I_1^{(1)}, I_1^{(2)}, I_2^{(2)}$ είναι όλες εικόνες της I σε ένα σύστημα που παράγεται από το C , και είναι μεταφορές της I_1 , δηλαδή, $I_1^{(2)} = I_1^{(1)} + L_{Cb}(1, 0, 0)$ και $I_2^{(2)} = I_1^{(1)} - L_{Cb}(1, 0, 0)$. Είναι $L(I_1^{(1)}, I_1^{(2)}) = L(I_1^{(1)}, I_1^{(2)}) := l/2$

αφού τα ζεύγη των εικόνων είναι στην ίδια σχετική θέση. Άρα έχουμε $LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) = l$. Άρα ο πίνακας περιέλιξης μπορεί να γραφτεί σαν

$$LM_{2C} = \begin{bmatrix} s & l \\ l & s \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

που είναι όμοιος με τον πίνακα

$$\begin{bmatrix} SL_P & l/2 \\ 0 & s - l/2 \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

με ιδιοτιμές $\lambda_1 = SL_P(I) = Sl(I_1) + L(I_1, I_2)$ ανδ $\lambda_2 = Sl(I_2) - L(I_1, I_2) = Sl(I_1 - L(I_1, I_2))$. Εάν κολλήσουμε τρία τέτοια κελιά παίρνουμε τον παρακάτω πίνακα

$$LM_{3C} = \begin{bmatrix} s & l/2 & l/2 \\ l/2 & s & l/2 \\ l/2 & l/2 & s \end{bmatrix} \quad (4.34)$$

που είναι όμοιος με τον πίνακα

$$\begin{bmatrix} s+l & l & l/2 \\ 0 & s-l/2 & 0 \\ 0 & 0 & s-l/2 \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

με ιδιοτιμές $\lambda'_1 = \lambda_1$ και $\lambda'_{2,3} = s - l/2 = SL(A_1) - Lk(A_1, A_2)/2$. Όμοια, για την συγκόλληση των τεσσάρων κελιών έχουμε τον παρακάτω πίνακα περιέλιξης

$$LM_{4C} = \begin{bmatrix} s & l/2 & 0 & l/2 \\ l/2 & s & l/2 & 0 \\ 0 & l/2 & s & l/2 \\ l/2 & 0 & l/2 & s \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

με ιδιοτιμές $\lambda''_1 = \lambda_1$ και $\lambda''_{2,3} = s, \lambda''_4 = 1 - s$.

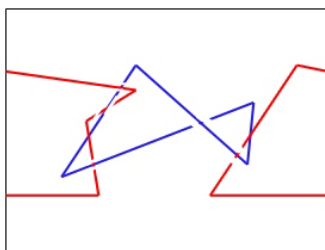
Παρατήρηση 4.1.14. Στο προηγούμενο παράδειγμα παρατηρούμε ότι

- (i) ο $SL_P(I)$ είναι μία ιδιοτιμή για όλους τους περιοδικούς πίνακες περιέλιξης
- (ii) εάν $s \cdot l > 0$ τότε η μεγαλύτερη ιδιοτιμή είναι $SL_P(I)$ για κάθε μέγεθος κελιών
- (iii) εάν $s \cdot l < 0$ τότε SL_P δεν είναι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή ανεξάρτητα του μεγέθους του κελιού

4.1.1.2 n κλειστές αλυσίδες σε ένα κελί με μία ΠΣΣ

Σε αυτή την παράγραφο θα επεκτείνουμε τα προηγούμενα αποτελέσματα στην περίπτωση n αλυσίδων σε ένα σύστημα με μία ΠΣΣ. Πρώτα δίνουμε ένα βοηθητικό παράδειγμα.

Παράδειγμα 1[Ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης του κελιού της Εικόνας 4.4]: Αυτό το κελί αποτελείται από δύο κλειστές γεννήτορες αλυσίδες, έστω i και j . Αυτές αντιστοιχούν σε δύο κλειστές ελεύθερες αλυσίδες I και J στο περιοδικό σύστημα, έτσι ώστε μία εικόνα του I κείται εντελώς μέσα στο C , και μία εικόνα J ξεδιπλώνει σε δύο κελιά.

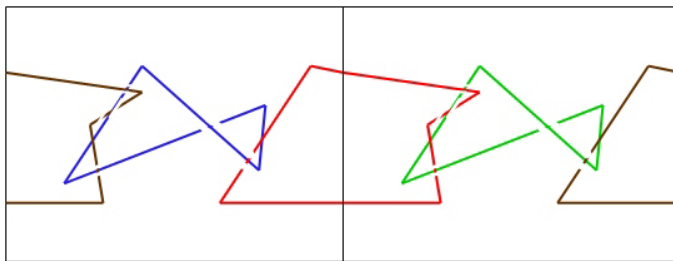


Σχήμα 4.4: Ένα κελί με δύο γεννήτορες αλυσίδες επιβάλλει μία ΠΣΣ. Μία εικόνα της ελεύθερης αλυσίδας I (κόκκινα τόξα) ξεδιπλώνεται στο C . Δύο εικόνες της ελεύθερης αλυσίδας J (μπλέ τόξα) τέμνουν το C .

για το κελί C , έχουμε τον πίνακα περιέλιξης

$$LM_C = \begin{bmatrix} SL_P(I) & LK_P(I, J) \\ LK_P(I, J) & SL_P(J) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

με ιδιοτιμές $\lambda_1 = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{37})$ και $\lambda_2 = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{37})$.



Σχήμα 4.5: Το κελί $2C$ αποτελείται από τέσσερις αλυσίδες γεννήτορες

Ας συγκολλήσουμε δύο κελιά για να φτιάξουμε ένα μεγαλύτερο κελί $2C$. Σε αυτό το κελί κείται τέσσερις αλυσίδες γεννήτορες, έστω $i^{(1)}, i^{(2)}, j^{(1)}, j^{(2)}$ (δείτε Εικόνα 4.5). Αυτές αντιστοιχούν σε τέσσερις ελεύθερες αλυσίδες στο περιοδικό σύστημα, $I^{(1)}, I^{(2)}, J^{(1)}, J^{(2)}$ και ο πίνακας περιέλιξης του νέου κελιού είναι

$$LM_{2C} = \begin{bmatrix} SL_P(I^{(1)}) & LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & LK_P(I^{(1)}, J^{(1)}) & LK_P(I^{(1)}, J^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & SL_P(I^{(2)}) & LK_P(I^{(2)}, J^{(1)}) & LK_P(I^{(2)}, J^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, J^{(1)}) & LK_P(I^{(2)}, J^{(1)}) & SL_P(J^{(1)}) & LK_P(J^{(1)}, J^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, J^{(2)}) & LK_P(I^{(2)}, J^{(2)}) & LK_P(J^{(1)}, J^{(2)}) & SL_P(J^{(2)}) \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

που είναι όμοιος με τον πίνακα

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.39)$$

με ιδιοτιμές $\lambda'_1 = \lambda_1, \lambda'_2 = \lambda_2$ ανδ $\lambda'_3 = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$ και $\lambda'_4 = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{5})$.

Παρατηρούμε ότι αυτός ο πίνακας έχει το ίδιο χαρακτηριστικό πολώνυμο με το ευθύ άθροισμα $LM_C \oplus LM_{22}$, όπου

$$LM_{22} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.40)$$

Έστω n αλυσίδες, I, J, \dots, W σε ένα σύστημα με μία ΠΣΣ.

Ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης αυτού του συστήματος είναι μεγέθους $n \times n$,

$$LM_C = \begin{bmatrix} SL_P(I) & LK_P(I, J) & \dots & LK_P(I, W) \\ LK_P(I, J) & SL_P(J) & \dots & LK_P(J, W) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ LK_P(I, W) & LK_P(J, W) & \dots & SL_P(W) \end{bmatrix} \quad (4.41)$$

Όταν ενώνουμε m κελιά, ο πίνακας LM_{mC} του κελιού mC είναι μεγέθους $mn \times mn$. Σε κάθε ελεύθερη αλυσίδα του κελιού C , αντιστοιχούν m ελεύθερες αλυσίδες στο κελί mC . Στην παραγματικότητα οι m ελεύθερες αλυσίδες είναι m υποσυλλογές εικόνων της αρχικής ελεύθερης αλυσίδας. Κάνουμε την σύμβαση ότι στον LM_{mC} οι σειρές $u, u+1, \dots, u+m-1$ αντιστοιχούν στις ελεύθερες αλυσίδες που δημιουργούνται από την ίδια αρχική ελεύθερη αλυσίδα στην σειρά u του αρχικού πίνακα περιέλιξης LM_C .

Λήμμα 4.1.15. Έστω C ένα κελί με μία ΠΣΣ που αποτελείται από n αλυσίδες που ξεδιπλώνονται σε $k_i, i = 1, \dots, n$ κελιά η κάθε μία. Έστω mC το κελί που διαμορφώνεται κολλώντας m αντίγραφα του C , τότε το άθροισμα όλων των στοιχείων κάθε σειράς $(u-1)m+v, v = 1, \dots, m$ του LM_{mC} ισούται με το άθροισμα όλων των στοιχείων της u -σειράς του LM_C , για κάθε m .

Απόδειξη. Ας υπολογίσουμε το συνολικό άθροισμα των στοιχείων της πρώτης σειράς:

Το άθροισμα των πρώτων k στοιχείων ισούται με $SL_P(I)$:

$$\begin{aligned}
& SL_P(I^{(1)}) + LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) + \dots + LK_P(I^{(1)}, I^{(m)}) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + umL_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&+ \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, (I_1 + L_{Cb}(1, 0, 0)) + u \cdot mL_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&+ \dots + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, (I_1 + (m-1)L_{Cb}(1, 0, 0)) + u \cdot mL_{Cb}(1, 0, 0)) \tag{4.42} \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + umL_{Cb}(1, 0, 0)) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (1+um)L_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&+ \dots + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (m-1+um)L_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} u \in \mathbb{Z} L(I_1, I_1 + uL_{Cb}(1, 0, 0)) = SL_P(I)
\end{aligned}$$

Το άθροισμα των επόμενων m στοιχείων είναι $LK_P(I, J)$:

$$\begin{aligned}
& LK_P(I^{(1)}, J^{(1)}) + LK_P(I^{(1)}, J^{(2)}) + \dots + LK_P(I^{(1)}, J^{(m)}) \\
&= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + umL_{Cb}(1, 0, 0)) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, (J_1 + L_{Cb}(1, 0, 0)) + u \cdot mL_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&+ \dots + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, (J_1 + (m-1)L_{Cb}(1, 0, 0)) + u \cdot mL_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + umL_{Cb}(1, 0, 0)) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + (1+um)L_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&+ \dots + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + (m-1+um)L_{Cb}(1, 0, 0)) \\
&= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + uL_{Cb}(1, 0, 0)) = LK_P(I, J)
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Όμοια για όλα τα σύνολα των επόμενων m στοιχείων. Άρα τελικά το άθροισμα των στοιχείων της πρώτης σειράς του LM_{mC} , είναι

$$SL_P(I) + LK_P(I, J) + \dots + LK_P(I, W) \tag{4.44}$$

που ισούται με το άθροισμα των στοιχείων της πρώτης σειράς του LM_C .

Παρατηρούμε ότι για τις επόμενες $m-1$ σειρές έχουμε πάλι ότι το άθροισμα των πρώτων m στοιχείων είναι:

$$\begin{aligned}
SL_P(I^{(1)}) &= SL_P(I^{(2)}) = \dots = SL_P(I^{(m)}) \\
&= SL(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_{mu}) = SL(I_1) + \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + muL(1, 0, 0))
\end{aligned} \tag{4.45}$$

Όμοίως όλες οι αλυσίδες $J^{(1)}, \dots, J^{(m)}$ κλπ.

Επίσης, είναι

$$LK_P(I^{h_1}, J^{h_2}) = \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1}, J^{h_2} + muL(1, 0, 0)) \tag{4.46}$$

και

$$\begin{aligned}
LK_P(I^{h'_1}, J^{h'_2}) &= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1}, J^{h'_2} + muL(1, 0, 0)) \\
&= \sum_{u \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1} + vL(1, 0, 0), I^{h'_1} + (v+mu)L(1, 0, 0))
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Όμως $I^{h_1}, J^{h_2} + muL(1, 0, 0)$ είναι στην ίδια σχετική θέση όπως τα $I^{h_1} + vL(1, 0, 0), I^{h'_1} + (v+mu)L(1, 0, 0)$, άρα,

$$LK_P(I^{h'_1}, J^{h'_2}) = LK_P(I^{h_1}, J^{h_2}), \text{ εάλ}h'_1 - h'_2 = h_1 - h_2 \pmod{m} \quad (4.48)$$

Το ίδιο ισχύει για όλα τα ζεύγη I^i, \dots, W^u .

Άρα το άθροισμα των επόμενων $m - 1$ σειρών είναι ξανά

$$SL_P(I) + LK_P(I, J) + \dots + LK_P(I, W) \quad (4.49)$$

Ομοίως, για τις επόμενες m σειρές το συνολικό άθροισμα είναι

$$SL_P(J) + LK_P(I, J) + \dots + LK_P(J, W) \quad (4.50)$$

και το ίδιο για όλες τις επόμενες m συλλογές σειρών.

□

Παρατήρηση 4.1.16. (i) Αυτό δείχνει ότι η συνολική περιέλιξη που εφαρμόζεται σε μία αλυσίδα παραμένει σταθερή, και είναι ανεξάρτητη από το μέγεθος του κελιού.

(ii) Το συνολικό άθροισμα των στοιχείων του πίνακα περιέλιξης εξαρτάται γραμμικά από το μέγεθος του κελιού. Τονίζουμε ότι στην περίπτωση μόνο μίας αλυσίδας το συνολικό άθροισμα όλων των στοιχείων μίας σειράς είναι το ίδιο για κάθε σειρά, αλλά στην περίπτωση περισσότερων αλυσίδων, το άθροισμα κάθε σειράς μπορεί να διαφέρει.

(iii) Από τις Εξ 4.45 και 4.48, ο LM_{mC} είναι ένας κυκλικός πίνακας.

Πρόταση 4.1.17. Έστω LM_C ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης ενός περιοδικού συστήματος παράγεται από το κελί C με μία ΠΣΣ, που περιέχει n αλυσίδες. Τότε κάθε άλλος περιοδικός πίνακας περιέλιξης LM_{mC} του ίδιου περιοδικού συστήματος παράγεται από το κελί MC είναι της μορφής

$$LM_{mC} = \begin{bmatrix} LM_C & D \\ 0 & E \end{bmatrix} \quad (4.51)$$

όπου D είναι μεγέθους $1 \times (m - 1)$ και E είναι μεγέθους $(m - 1) \times (m - 1)$.

Απόδειξη. Παρατηρούμε ότι μπορούμε να δούμε έναν πίνακα περιέλιξης σαν έναν μπλοκ πίνακα τα στοιχεία του οποίου είναι πίνακες διάστασης $m \times m$, ως εξής:

$$LM_{mC} = \begin{bmatrix} LM_{1,1} & LM_{1,2} & \dots & LM_{1,nm} \\ LM_{1,2} & LM_{2,2} & \dots & LM_{2,nm} \\ \vdots & & & \\ LM_{1,nm} & LM_{2,nm} & \dots & LM_{nm,nm} \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

Οι διαγώνιοι πίνακες, έστω $LM_{1,1}$, αφορούν την περιέλιξη των γεννητόρων αλυσίδων που είναι εικόνες της ίδιας γεννητόρου αλυσίδας, έστω I , στο αρχικό κελί C . Παρατηρούμε ότι ο πίνακας $LM_{1,1}$ είναι ακριβώς ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης του κελιού C_I που δημιουργείται από το κελί C εαν αγνοήσουμε όλες τις γεννήτορες αλυσίδες εκτός της i .

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & & & & & & & & & \\ 1 & \dots & 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & & & & \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.53)$$

που είναι ο πίνακας για τον οποίο $[Q]_{ij} = 1$ για $j \leq i$ και $[Q]_{ij} = 0, j > i$, και

$$Q^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & & \\ 0 & \dots & -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.54)$$

που είναι ο πίνακας για τον οποίο $[Q^{-1}]_{ii} = 1$, $[Q^{-1}]_{i,i-1} = -1$ και $[Q^{-1}]_{ij} = 0$ για $j \neq i, i-1$.

Εάν πολλαπλασιάσουμε τον LM_{mC} με τους πίνακες $Q' = Q \oplus Q \oplus \dots \oplus Q$ και $(Q')^{-1} = Q^{-1} \oplus Q^{-1} \oplus \dots \oplus Q^{-1}$, (n ευθέα αθροίσματα για κάθε όρο), όπου Q και Q^{-1} είναι γινόμενα απλών πινάκων όπως στην Πρόταση 4.1.11, υπολογίζουμε τα στοιχεία του πίνακα $(Q')^{-1}LM_{mC}Q'$ ως εξής:

Πρώτα για τα διαγώνια στοιχεία έχουμε

$$[(Q')^{-1}LM_{mC}Q']_{ii} = \sum_{1 \leq u \leq n} [(Q')^{-1}]_{i,u} \sum_{1 \leq v \leq n} LM_{u,v}[Q']_{v,j} \quad (4.55)$$

και έχουμε ότι $[Q']_{v,j} = 0$ αν $v \neq j$, και $[Q']_{j,j} = Q$. Όμοια, $[(Q')^{-1}]_{v,j} = 0$ αν $v \neq j$, και $[(Q')^{-1}]_{j,j} = Q^{-1}$ άρα είναι

$$[Q^{-1}LM_{mC}Q]_{ij} = [(Q')^{-1}]_{i,i}LM_{u,j}[Q']_{j,j} = Q^{-1}LM_{i,j}Q \quad (4.56)$$

Τότε τα διαγώνια στοιχεία, δείξαμε ότι στην απόδειξη της Πρότασης 4.1.11 ότι

$$Q^{-1}LM_{i,i}Q = \begin{bmatrix} SL_P & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & & & \\ 0 & * & \dots & * \end{bmatrix} \quad (4.57)$$

για $i \neq j$, τότε στην απόδειξη του Λήμματος 4.1.7 αποδείξαμε ότι το άθροισμα όλων των στοιχείων μίας σειράς του $LM_{i,j}$ ισούται με $LK_P(I, J)$. Τότε υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} [Q^{-1}LM_{i,j}Q]_{u,v} &= \sum_{1 \leq s \leq m} [Q^{-1}]_{u,s} \left[\sum_{1 \leq t \leq m} [LM_{i,j}]_{v,t} [Q]_{t,s} \right] \\ &= \sum_{1 \leq s \leq m} [Q^{-1}]_{u,s} \left[\sum_{s \leq t \leq m} [LM_{i,j}]_{v,t} [Q]_{t,s} \right] = \sum_{v \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{s,v} - \sum_{v \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{s+1,v} \\ &= \sum_{v \leq s \leq m} ([LM_{i,j}]_{s,v} - [LM_{i,j}]_{s+1,v}) \end{aligned} \quad (4.58)$$

όπου παρατηρήσαμε ότι $[Q]_{t,s} = 0$ για $t < s$, και $[Q]_{t,s} = 1$ για $t \geq s$. Επίσης $[Q]_{t,s}^{-1} = 0$ για κάθε $s \neq t-1, t$ και $[Q^{-1}]_{t,t-1} = -1, [Q^{-1}]_{t,t} = 1$.

Άρα για $u > 1, v = 1$, από το Λήμμα 4.1.15 έχουμε ότο το άθροισμα κάθε σειράς $LM_{i,j}$ είναι $LK_P(I, J)$:

$$\begin{aligned} [Q^{-1}LM_{i,j}Q]_{u1} &= \sum_{1 \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{u,s} - \sum_{1 \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{u+1,s} \\ &= LK_P(I, J) - LK_P(I, J) = 0 \end{aligned} \quad (4.59)$$

Άρα αποδείξαμε ότι

$$Q^{-1}LM_{i,j}Q = \begin{bmatrix} LK_P & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & & & \\ 0 & * & \dots & * \end{bmatrix} \quad (4.60)$$

Άρα έχουμε

$$\begin{aligned}
(Q')^{-1}LM_{mC}Q' = & \\
& \left[\begin{array}{cccccc}
SL_P(I) & * & \dots & LK_P(I, J) & * & \dots & LK_P(I, W) & * & \dots \\
0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\
\dots & & & & & & & & \\
0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\
LK_P(I, J) & * & \dots & SL_P(J) & * & \dots & LK_P(J, W) & * & \dots \\
0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\
\dots & & & & & & & & \\
\dots & & & & & & & & \\
LK_P(I, W) & * & \dots & LK_P(J, W) & * & \dots & SL_P(W) & * & \dots \\
0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\
\dots & & & & & & & & \\
0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots
\end{array} \right] \tag{4.61}
\end{aligned}$$

Τότε ανταλλάσσοντας σειρές και κολώνες δείχνουμε ότι αυτός ο πίνακας είναι όμοιος με τον επόμενο πίνακα

$$\begin{aligned}
LM_{mC} \sim & \\
& \left[\begin{array}{cccccc}
SL_P(I) & LK_P(I, J) & \dots & LK_P(I, W) & * & \dots & * & \dots \\
LK_P(I, J) & SL_P(J) & \dots & LK_P(J, W) & * & \dots & * & \dots \\
\dots & & & & & & & \\
LK_P(I, W) & LK_P(J, W) & \dots & SL_P(W) & * & \dots & * & \dots \\
0 & 0 & \dots & 0 & * & \dots & * & \dots \\
\dots & & & & & & & \\
\dots & & & & & & & \\
0 & 0 & \dots & 0 & * & \dots & * & \dots
\end{array} \right] \tag{4.62} \\
& \sim \left[\begin{array}{cccc}
LM_C & * & \dots & * & \dots \\
0 & * & \dots & * & \dots \\
\dots & & & & \\
\dots & & & & \\
0 & * & \dots & * & \dots
\end{array} \right]
\end{aligned}$$

□

Παρατήρηση 4.1.18. Εάν θεωρήσουμε τις αλυσίδες σε ένα τήγμα να παράγουν έναν διανυσματικό χώρο, τότε ο πίνακας LM'_{mC} εκφράζεται ως προς την νέα βάση:

$$b' = Q^{-1}bQ = \begin{bmatrix} I_k - I_1 \\ \vdots \\ I_k - I_{k-1} \\ \vdots \\ J_k - J_{k-1} \\ \vdots \\ W_k - W_1 \\ \vdots \\ W_k - W_{k-1} \end{bmatrix} \quad (4.63)$$

Παρατήρηση 4.1.19. Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων ο LM_{mC} είναι ένας αραιός πίνακας για m αρκετά μεγάλο. Ας υποθέσουμε ότι κολλάμε $m > \max_I k_I$ κελιά (όπου k_I είναι το πλήθος κελιών του ελαχιστικού ξεδιπλώματος μίας αλυσίδας του C .) Τότε:

$$SL_P(I^{(h)}) = sl(I_1) := s \quad (4.64)$$

$$LK_P(I^{(h_1)'}, I^{(h_2)'}) = LK_P(I^{(h_1)}, I^{(h_2)}), \quad h_2' - h_1' = h_2 - h_1 \pmod{m} \quad (4.65)$$

$$LK_P(I^{(h_1)}, I^{(h_2)}) = 0, \quad h_2 - h_1 > k \pmod{m} \quad (4.66)$$

και

$$LK_P(I^{(h_1)'}, J^{(h_2)'}) = LK_P(I^{(h_1)}, J^{(h_2)}), \quad h_2' - h_1' = h_2 - h_1 \pmod{m} \quad (4.67)$$

Άρα μπορεί να υπάρχουν έως k_i διαφορετικές τιμές για το $LK_P(I^{(h_1)}, I^{(h_2)})$, έστω l_1, l_2, \dots, l_{k_i} , και για κάθε ζεύγος $I^{(h_1)}, I^{(h_2)}$, υπάρχει ένα ζεύγος $I^{h_1}, I^{(h_1-h_2) \bmod m}$ στην ίδια σχετική θέση. Επίσης μπορεί να υπάρχουν μέχρι $k_{ij} = \max\{k_i, k_j\}$ διαφορετικές τιμές για τα $LK_P(I^{(h_1)}, J^{(h_2)})$, έστω $ij_1, ij_2, \dots, ij_{k_{ij}}$.

Παράδειγμα 2[Γενικό παράδειγμα δύο αλυσίδων σε μία ΠΣΣ που ξεδιπλώνουν σε δύο κελιά]: Έστω δύο αλυσίδες και ένα κελί C τέτοιες ώστε ξεδιπλώνονται και οι δύο σε δύο κελιά, τότε ο πίνακας περιέλιξης θα έχει την μορφή

$$LM_C = \begin{bmatrix} SL_P(I) & LK_P(I, J) \\ LK_P(I, J) & SL_P(J) \end{bmatrix} \quad (4.68)$$

όπου $SL_P(I) = Sl(I_1) + L(I_1, I_2)$, $SL_P(J) = Sl(J_1) + L(J_1, J_2)$ και $LK_P(I, J) = L(I_1, J_1) + L(I_1, J_2)$.

Η αυτο-περιέλιξη της αλυσίδας I_1 θα είναι η αυτο-περιέλιξη της ξεδιπλωμένης εικόνας, αφού περιέχεται ολόκληρη στο κελί. Η αυτο-περιέλιξη της αλυσίδας I_2 θα ισούται και πάλι με την αυτο-περιέλιξη της ξεδιπλωμένης εικόνας αφού δεν διαπλέκεται με δικές της εικόνες. Άρα συμβολίζουμε $Sl(I_1) = Sl(I_2) = s_I$. Ομοίως $Sl(J_1) = Sl(J_2) = s_J$. Αφού οι αλυσίδες I_1, J_1 κείτονται εξ ολοκλήρου μέσα στο κελί, και οι αλυσίδες I_2, J_2 φθάνουν στο σύνορο του κελιού και ξαναμπαίνουν, μπορούμε να δούμε τις ξεδιπλωμένες εικόνες I_2, J_2 σαν μία μεταφορά των εικόνων των I_1, J_1 κρατώντας τις σχετικές τους θέσεις σταθερές. Άρα μπορούμε να δούμε ότι $L(I_1, J_1) = L(I_2, J_2) = x$. Λόγω της συμμετρίας που επιβάλλουν οι ΠΣΣ μπορούμε να δούμε επίσης ότι $L(I_1, J_2) = L(I_2, J_1) = y$, άρα οι προηγούμενοι πίνακες περιέλιξης έχουν την μορφή

$$LM_C = \begin{bmatrix} s_I + l_I & x + y \\ x + y & s_I + l_I \end{bmatrix} \quad (4.69)$$

με ιδιοτιμές

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(l_I + l_J + s_I + s_J \pm \sqrt{(-l_I - l_J - s_I - s_J)^2 - 4(l_I l_J + l_J s_I + l_I s_J + s_I s_J - (x + y)^2)}) \quad (4.70)$$

Ας θεωρήσουμε την συγκόλληση δύο κελιών, τότε έχουμε δύο ολοκληρωμένες αλυσίδες, I_1, J_1 , μέσα στο κελί και δύο αλυσίδες που φθάνουν στο σύνορο και ξαναμπαίνουν, I_2, J_2 . Ο πίνακας περιέλιξης είναι

$$LM_{2C} = \begin{bmatrix} SL_P(I^{(1)}) & LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & LK_P(I^{(1)}, J^{(1)}) & LK_P(I^{(1)}, J^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & SL_P(I^{(2)}) & LK_P(I^{(2)}, J^{(1)}) & LK_P(I^{(2)}, J^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, J^{(1)}) & LK_P(I^{(2)}, J^{(2)}) & SL_P(J^{(1)}) & LK_P(J^{(1)}, J^{(2)}) \\ LK_P(I^{(1)}, I^{(2)}) & LK_P(I^{(2)}, I^{(2)}) & LK_P(J^{(1)}, J^{(2)}) & SL_P(J^{(2)}) \end{bmatrix} \quad (4.71)$$

$$= \begin{bmatrix} s_I & l_I & x & y \\ l_I & s_I & y & x \\ x & y & s_J & l_J \\ y & x & l_J & s_J \end{bmatrix}$$

με ιδιοτιμές $\lambda'_{1,2} = \lambda_{1,2}$ και

$$\lambda'_{3,4} = \frac{1}{2}(-l_I - l_J + s_I + s_J) \pm \sqrt{(l_I + l_J - s_I - s_J)^2 - 4(l_I l_J - l_J s_I - l_I s_J + s_I s_J - (x - y)^2)} \quad (4.72)$$

Ο πίνακας περιέλιξης LM_{2C} είναι όμοιος με τον παρακάτω πίνακα

$$QL_{2Cb}Q^{-1} = \begin{bmatrix} s_I + l_I & x + y & l_A & x \\ x + y & s_J + l_J & x & l_B \\ 0 & 0 & s_I - l_I & x - y \\ 0 & 0 & y - x & s_J - l_J \end{bmatrix} \quad (4.73)$$

που έχει το ίδιο χαρακτηριστικό πολυώνυμο όπου το ευθύ άθροισμα $LM_C \oplus (LM_{2C})_{22}$, όπου

$$(LM_{2C})_{22} = \begin{bmatrix} s_A - l_A & x - y \\ y - x & s_B - l_B \end{bmatrix} \quad (4.74)$$

με ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \lambda'_3, \lambda'_4$.

Ας θεωρήσουμε τώρα την συγκόλληση τριών κελιών, τότε έχουμε τέσσερις αλυσίδες $I^{(1)}, I^{(2)}, J^{(1)}, J^{(2)}$ που κείτονται μέσα στο μεγάλο αυτό κελί και δύο αλυσίδες $I^{(3)}, J^{(3)}$ που ακουμπούν τις έδρες του κελιού αυτού. Ο πίνακας περιέλιξης που αντιστοιχεί σε αυτό το μεγάλο κελί είναι τότε

$$LM_{3C} = \begin{bmatrix} s_I & l_I/2 & l_I/2 & u & v & z \\ l_I/2 & s_I & l_I/2 & z & u & v \\ l_I/2 & l_I/2 & s_I & v & z & u \\ u & z & v & s_J & l_J/2 & l_J/2 \\ v & u & z & l_J/2 & s_J & l_J/2 \\ z & v & u & l_J/2 & l_J/2 & s_J \end{bmatrix} \quad (4.75)$$

όπου $u = L(I_1, J_1) = L(I_2, J_2) = L(I_3, J_3)$, $v = L(I_1, J_2) = L(I_2, J_3) = L(I_3, J_1)$, $z = L(I_1, J_3) = L(I_2, J_1) = L(I_3, J_2)$ και $u + v + z = x + y = L(I, J)$. Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία με πρὶν μπορούμε να δείξουμε ότι αυτός είναι όμοιος με τον παρακάτω πίνακα

$$QLM_{3C}Q^{-1} = \begin{bmatrix} s_I + l_I & u + v + z & l_I/2 & l_I & u + z & u \\ u + v + z & s_J + l_J & u & u + z & l_J & l_J/2 \\ 0 & 0 & s_I - l_I/2 & 0 & z - u & z - v \\ 0 & 0 & 0 & s_I - l_I/2 & v - z & v - u \\ 0 & 0 & v - u & v - z & s_J - l_J/2 & 0 \\ 0 & 0 & z - v & z - u & 0 & s_J - l_J/2 \end{bmatrix} \quad (4.76)$$

που έχει το ίδιο χαρακτηριστικό πολυώνυμο με το ευθύ άθροισμα $LM_C \oplus (LM_{3C})_{22}$, όπου

$$(LM_{3C})_{22} = \begin{bmatrix} l_I/2 & l_I & u+z & u \\ u & u+z & l_J & l_J/2 \\ s_I - l_I/2 & 0 & z-u & z-v \\ 0 & s_I - l_I/2 & v-z & v-u \\ v-u & v-z & s_J - l_J/2 & 0 \\ z-v & z-u & 0 & s_J - l_J/2 \end{bmatrix} \quad (4.77)$$

με ιδιοτιμές λ_1, λ_2 , και

$$\begin{aligned} \lambda''_{3,4} = & \frac{1}{8}(-2l_I - 2l_J + 4s_I + 4s_J + \\ & ((2l_I + 2l_J - 4s_I - 4s_J)^2 - 16(l_I l_J - 2l_I s_J - 2l_I s_J + 4s_I s_J \\ & - 2(x-y)^2 - 2(x-z)^2 - 2(y-z)^2 + yz))^{1/2}) \end{aligned} \quad (4.78)$$

Εάν συγκολλήσουμε τέσσερα κελιά έχουμε:

$$LM_{4C} = \begin{bmatrix} s_I & l_I/2 & 0 & l_I/2 & u & v & 0 & z \\ l_I/2 & s_I & l_I/2 & 0 & z & u & v & 0 \\ 0 & l_I/2 & s_I & l_I/2 & 0 & z & u & v \\ l_I/2 & 0 & l_I/2 & s_I & v & 0 & z & u \\ u & z & 0 & v & s_J & l_J/2 & 0 & l_J/2 \\ v & u & z & 0 & l_J/2 & s_J & l_J/2 & 0 \\ 0 & v & u & z & 0 & l_J/2 & s_J & l_J/2 \\ z & 0 & v & u & l_J/2 & 0 & l_J/2 & s_J \end{bmatrix} \quad (4.79)$$

που είναι όμοιος με τον πίνακα

$$\begin{bmatrix} l_I + s_I & u+v+z & l_I & l_I/2 & l_I/2 & u+z & u+z & u \\ u+v+z & l_J + s_J & u+z & u & u+z & l_J & l_J/2 & l_J/2 \\ 0 & 0 & s_I - l_I/2 & -l_I/2 & 0 & v & v-z & v-u \\ 0 & 0 & -l_I/2 & s_I - l_I/2 & 0 & z-u & z-v & z \\ 0 & 0 & l_I/2 & l_I/2 & s_I & -z & -u & -v \\ 0 & 0 & v & v-u & v-z & s_J - l_J/2 & 0 & -l_J/2 \\ 0 & 0 & -z & -v & -u & l_J/2 & s_J & l_J/2 \\ 0 & 0 & z-u & z & z-v & -l_J/2 & 0 & s_J - l_J/2 \end{bmatrix} \quad (4.80)$$

που έχει το ίδιο χαρακτηριστικό πολυώνυμο με τον $LM_C \oplus (LM_{4C})_{sub}$.

Οι ιδιοτιμές του είναι:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(l_I + l_J + s_I + s_J \pm ((-l_I - l_J - s_I - s_J)^2 - 4(l_I l_J + l_J s_I + l_I s_J + s_I s_J - u^2 - 2uv - v^2 - 2uz - 2vz - z^2))^{1/2})$$

$$\lambda_{3,4} = \frac{1}{2}(-l_I - l_J + s_I + s_J \pm ((l_I + l_J - s_I - s_J)^2 - 4(l_I l_J - l_J s_I - l_I s_J + s_I s_J - u^2 + 2uv - v^2 + 2uz - 2vz - z^2))^{1/2})$$

$$\lambda_{5,6,7,8} = \frac{1}{2}(s_I + s_J - (s_I^2 - 2s_I s_J + s_J^2 + 4u^2 + 4v^2 - 8vz + 4z^2)).$$

Παρατήρηση 4.1.20. Στο προηγούμενο παράδειγμα παρατηρούμε ότι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή δεν είναι αναλλοίωτη ανάλογα εμ τα πρόσημα των s_I, s_J, l_I, l_J, x, y .

4.1.2 Συστήματα με δύο ή τρεις ΠΣΣ

Σε αυτή την παράγραφο θα εθωρήσουμε συστήματα με δύο ή τρεις ΠΣΣ. Η ανάλυση σε αυτή την παράγραφο ακολουθεί την ίδια μέθοδο όπως στην περίπτωση μίας ΠΣΣ.

Θα μελετήσουμε τον πίνακα περιέλιξης ενός τέτοιου συστήματος καθώς μεγαλώνουμε το μέγεθος του κελιού. Θα επικεντρωθούμε στην περίπτωση τριών ΠΣΣ. Τα αποτελέσματα για δύο ΠΣΣ προκύπτουν εάν αγνοήσουμε την z -κατεύθυνση. Παρατηρούμε ότι κελιά μπορούν να συγκολληθούν προς τις x, y και z κατευθύνσεις, ώστε να φτιάξουμε ένα μεγαλύτερο περιοδικό κελί. Όμως παρατηρούμε ότι εάν κολλήσουμε κελιά στις $x-, y-$ και $z-$ κατευθύνσεις τυχαία, η περιοδική δομή που προκύπτει μπορεί να μην είναι τέτοια που να μπορούμε να κολλήσουμε αντίγραφα του κελιού σύμφωνα με τις ΠΣΣ για να φτιάξουμε ένα μεγάλο περιοδικό σύστημα. Άρα, σε κάθε μεγέθυνση, κολλάμε κελιά σε κάθε κατεύθυνση γύρω από το σύνορο του C . Δηλαδή, το κελί $2C$ δημιουργείται από το κελί C κολλώντας τις γύρω 26 μεταφορές του C . Το κελί mC είναι το κελί που δημιουργείται από $(2m+1)^3$ αντίγραφα του C . Από το Λήμμα 4.1.1 γνωρίζουμε ότι υπάρχουν $(2m+1)^3$ γεννήτορες αλυσίδες στο mC (και $(2m+1)^3$ ελεύθερες αλυσίδες).

Παρατήρηση 4.1.21. Για δύο ΠΣΣ, κολλάμε κελιά γύρω στις 8 κατευθύνσεις του συνόρου του C , δηλαδή, κολλάμε τα παρακάτω κελιά: $(1, 0, 0)$, $(-1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, -1, 0)$, $(1, 1, 0)$, $(1, -1, 0)$, $(-1, 1, 0)$, $(-1, -1, 0)$. Έτσι παίρνουμε ξανά ένα κυβικό κελί. Ομοίως το κελί mC είναι το κυβικό κελί που δημιουργείται κολλώντας $(2m+1)^2$ αντίγραφα του C . Εάν το C έχει n γεννήτορες αλυσίδες, τότε από το Λήμμα 4.1.4, το C έχει $(2m+1)^2 n$ γεννήτορες αλυσίδες.

Ας κάνουμε την σύμβαση να ονομάζουμε τα κελιά σύμφωνα με την θέση τους ως προς το κελί γεννήτορα, που βρίσκεται στη θέση $(0, 0, 0)$. Κάθε ελεύθερη αλυσίδα είναι μία μεταφορά της άλλης, και ονομάζουμε τις αλυσίδες σύμφωνα με την μεταφορά τους ως προς την

πρωταρχική τους εικόνα $I^{(0,0,0)}$, το σημείο βάσης της οποίας κείται στο κεντρικό κελί, δηλαδή $I^{(h_1, h_2, h_3)} = I^{(0,0,0)} + L_C(h_1, h_2, h_3)$. Θεωρούμε το μικρότερο τετραγωνικό κελί που δημιουργείται κολλώντας αντίγραφα του C , που περιέχει την I . Έστω διάστασης $k_x L_{Cb} \times k_y L_{Cb} \times k_z L_{Cb}$. Τότε παρατηρούμε ότι εάν $2m + 1 < \max\{k_x, k_y, k_z\}$, είναι αδύνατον για μία εικόνα του I να ξεδιπλώνεται στο mC .

Λήμμα 4.1.22. Έστω I μία ελεύθερη αλυσίδα σε ένα σύστημα με δύο ΠΣΣ με κελί γεννήτορα C . Έστω ότι k_x, k_y και k_z είναι οι μέγιστες τιμές των διαστάσεων του ελαχιστικού ξεδιπλώματος μίας εικόνας I σε κάθε κατεύθυνση. Έστω mC το νέο κελί που δημιουργείται κολλώντας $(2m + 1)^3$ αντίγραφα του C , όπου $2m + 1 = w_x k_x + w'_x$, $2m + 1 = w_y k_y + w'_y$ και $2m + 1 = w_z k_z + w'_z$, όπου $w'_x < k_x, w'_y < k_y, w'_z < k_z$ και $w_x, w_y, w_z \in \mathbb{N}$. Υπάρχουν $((w_x - 1)k_x + w'_x + 1)((w_y - 1)k_y + w'_y + 1)((w_z - 1)k_z + w'_z + 1)$ ελεύθερες αλυσίδες στο mC των οποίων οι εικόνες ξεδιπλώνονται εντελώς.

Απόδειξη. Παρατηρούμε ότι ανεξάρτητα του ελαχιστικού ξεδιπλώματος μίας αλυσίδας, σε $k_x k_y k_z$ κελιά μόνο μία εικόνα της ελεύθερης αλυσίδας I μπορεί να ξεδιπλωθεί στο $k_1 C$. Ας υποθέσουμε ότι $2m + 1 = \max\{k_x, k_y, k_z\}$. Τότε υπάρχει ακριβώς μία ελεύθερη αλυσίδα της οποίας η εικόνα ξεδιπλώνεται εντελώς, και οι υπόλοιπες $(2m + 1)^3 - 1$ ελεύθερες αλυσίδες ακουμπούν το σύνορο του κελιού. Ομοίως, για κάθε m , υπάρχουν τόσες ελεύθερες αλυσίδες όσες οι εικόνες τους ξεδιπλώνονται στο mC , όσα δηλαδή διαφορετικά τετράεδρα εμβαδού $k_x k_y k_z$ υπάρχουν μέσα στο mC . Αυτά είναι ακριβώς $(2m + 1 - k_x)(2m + 1 - k_y)(2m + 1 - k_z) = ((w_x - 1)k_x + w'_x + 1)((w_y - 1)k_y + w'_y + 1)((w_z - 1)k_z + w'_z)$.

□

4.1.2.1 Μία κλειστή αλυσίδα σε ένα κελί με δύο ή τρεις ΠΣΣ

Ας θεωρήσουμε μία ελεύθερη αλυσίδα, έστω I σε ένα σύστημα με τρεις ΠΣΣ. Ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης αυτού του συστήματος είναι διάστασης 1×1 , $LM_C = SL_P(I) = SI(I_1) + \sum_i L(I_1, I_i)$. Ακριβώς το ίδιο ισχύει για συστήματα με δύο ΠΣΣ. Γενικά, όλα μπορούν να αναχθούν στην περίπτωση δύο ΠΣΣ αγνοώντας την z κατεύθυνση.

Λήμμα 4.1.23. Έστω C το κελί με τρεις ΠΣΣ (αντ. δύο ΠΣΣ) που αποτελείται από μία μόνο αλυσίδα. Έστω mC το κελί που διαμορφώνεται αφού κολλήσουμε $(2m + 1)^3$ (αντ. $(2m + 1)^2$) αντίγραφα του C ώστε να φτιάξουμε ένα μεγαλύτερο κελί σε τρεις ΠΣΣ (αντ. δύο ΠΣΣ) των οποίων οι x, y και z διαστάσεις είναι $2m + 1$, τότε το άθροισμα όλων των όρων μίας σειράς του LM_{mC} ισούται με $SL_P(I)$, για κάθε m .

Απόδειξη. Ας υπολογίσουμε το συνολικό άθροισμα των όρων της πρώτης σειράς:

$$\begin{aligned}
& SL_P(I^{(0,0,0)}) + LK_P(I^{(0,0,0)}, I^{(0,0,1)}) + \dots + LK_P(I^{(0,0,0)}, I^{(-m,-m,-m)}) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&+ \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}(0, 1, 0) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&+ \dots + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}(-m, -m, -m) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&+ \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}((2m+1)u_1, (2m+1)u_2, (2m+1)u_3) + 1) \\
&+ \dots \\
&+ \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}((2m+1)u_1 - m, (2m+1)u_2 - m, (2m+1)u_3 - m)) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= SL_P(I)
\end{aligned} \tag{4.81}$$

Παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned}
SL_P(I^{(0,0,0)}) &= SL_P(I^{(0,0,1)}) = \dots = SL_P(I^{(-m,-m,-m)}) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_{m(u_1, u_2, u_3)}) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1 \in \mathbb{Z}} \sum_{u_2 \in \mathbb{Z}} \sum_{u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + mL_{Cb}(u_1, u_2, u_3))
\end{aligned} \tag{4.82}$$

αφού $Sl(I_1)$ είναι το ίδιο για κάθε εικόνα I_u , και όλες οι εικόνες $I_i + mL_{Cb}(u_1, u_2, u_3)$ και I_i είναι στις ίδιες σχετικές θέσεις όπως οι $I_1 + mL_{Cb}(u_1, u_2, u_3)$ σε σχέση με την I_1 .

Επίσης είναι

$$\begin{aligned}
& LK_P(I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_4, h_5, h_6}) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_4, h_5, h_6} + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_1, h_2, h_3} \\
&\quad + L_{Cb}(h_4 - h_1, h_5 - h_2, h_6 - h_3) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_1, h_2, h_3} \\
&\quad + L_{Cb}((h_3 - h_1) + (2m+1)u_1, (h_4 - h_2) + (2m+1)u_2, (2m+1)u_3))
\end{aligned} \tag{4.83}$$

και

$$\begin{aligned}
& LK_P(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, I^{h'_4, h'_5, h'_6}) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, I^{h'_4, h'_5, h'_6} + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, I^{h'_1, h'_2, h'_3} + L_{Cb}((h'_4 - h'_1), (h'_5 - h'_2), (h'_6 - h'_3)) \\
&\quad + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, I^{h'_1, h'_2, h'_3} + L_{Cb}((h'_4 - h'_1) \\
&\quad + (2m+1)u_1, (h'_5 - h'_2) + (2m+1)u_2, (h'_6 - h'_3) + (2m+1)u_3)) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, I^{h'_1, h'_2, h'_3} \\
&\quad + L_{Cb}((h_4 - h_1) + (2m+1)u_1, (h_5 - h_2) + (2m+1)u_2, (h_6 - h_3) + (2m+1)u_3))
\end{aligned} \tag{4.84}$$

Όμως οι $I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_1, h_2, h_3} + L_{Cb}((h_4 - h_1) + (2m+1)u_1, (h_5 - h_2) + (2m+1)u_2, (h_6 - h_3) + (2m+1)u_3)$ είναι στις ίδιες σχετικές θέσεις με τις $I^{h'_1, h'_2, h'_3}, I^{h'_1, h'_2, h'_3} + L_{Cb}((h_4 - h_1) + (2m+1)u_1, (h_5 - h_2) + (2m+1)u_2, (h_6 - h_3) + (2m+1)u_3)$, άρα, $LK_P(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, I^{h'_4, h'_5, h'_6}) = LK_P(I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_4, h_5, h_6})$.

Άρα για κάθε $I^{(h'_1, h'_2, h'_3)}, I^{(h'_4, h'_5, h'_6)}$ έτσι ώστε $h'_4 - h'_1 = h_4 - h_1, h'_5 - h'_2 = h_5 - h_2, h'_6 - h'_3 = h_6 - h_3$, έχουμε

$$LK_P(I^{(h'_1, h'_2, h'_3)}, I^{(h'_4, h'_5, h'_6)}) = LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, I^{(h_4, h_5, h_6)}) \tag{4.85}$$

Άρα το άθροισμα όλων των όρων μίας σειράς είναι ίσο με $SL_P(I)$.

□

Παρατήρηση 4.1.24. [Αποτελέσματα του Λήμματος 4.1.23]:

(i) Η συνολική περιέλιξη του εφαρμόζεται σε μία αλυσίδα παραμένει σταθερή, ανεξάρτητα από το μέγεθος του κελιού.

(ii) Το συνολικό άθροισμα των όρων του πίνακα εξαρτάται γραμμικά από το μέγεθος του κελιού. Έστω $Total(LM_C)$ το συνολικό άθροισμα των όρων του περιοδικού πίνακα περιέλιξης LM_C . Τότε έχουμε $Total(LM_{mC}) = (2m+1)Total(LM_C) = (2m+1)SL(I)$.

(iii) Από τις Εξ. 4.82 και 4.85, ο LM_{mC} είναι ένας κυκλικός πίνακας.

Πρόταση 4.1.25. Έστω μία ελεύθερη αλυσίδα I στο περιοδικό σύστημα που δημιουργείται από ένα κελί με τρεις ΠΣΣ. Υποθέτουμε ότι μία εικόνα της I ξεδιπλώνεται σε k κελιά. Τότε για τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης L_{mC} του περιοδικού συστήματος που παράγεται από ένα μεγαλύτερο κελί, mC , από $(2m+1)^3$ συγκολλημένα κελιά, έχουμε

$$L_{mCb} = \begin{bmatrix} SL_P(I) & D \\ 0 & E \end{bmatrix} \quad (4.86)$$

όπου D είναι μεγέθους $1 \times ((2m+1)^3 - 1)$ και E είναι μεγέθους $((2m+1)^3 - 1) \times ((2m+1)^3 - 1)$.

Απόδειξη. Για τον πίνακα $LM'_{mC} = Q^{-1}L_{mC}Q$ έχουμε ότι το στοιχείο $[LM'_{mC}]_{ij}$ μπορεί να εκφραστεί σαν:

$$\begin{aligned} [LM'_{mC}]_{ij} &= \sum_{1 \leq u \leq m} [Q^{-1}]_{iu} \left[\sum_{1 \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{uv} [Q]_{vj} \right] \\ &= \sum_{1 \leq u \leq m} [Q^{-1}]_{iu} \left[\sum_{j \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{uv} \right] = \sum_{j \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{iv} - \sum_{j \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{i+1,v} \\ &= \sum_{j \leq v \leq m} ([LM_{mC}]_{iv} - [LM_{mC}]_{i+1,v}) \end{aligned} \quad (4.87)$$

όπου παρατηρήσαμε ότι $[Q]_{vj} = 0$ για $v < j$, και $[Q]_{vj} = 1$ για $v \geq j$. Επίσης, είναι $[Q^{-1}]_{iu} = 0$ για κάθε $u \neq i-1, i$ και $[Q]_{i,i-1} = -1, [Q]_{ii} = 1$.

Άρα, για $i > 1, j = 1$, από το Λήμμα 4.1.23 έχουμε:

$$[LM'_{mC}]_{i1} = \sum_{1 \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{iv} - \sum_{1 \leq v \leq m} [LM_{mC}]_{i+1,v} = SL_P(I) - SL_P(I) = 0 \quad (4.88)$$

Άρα ο πίνακας περιέλιξης μπορεί να εκφραστεί σαν

$$LM_{mC} \sim LM'_{mC} = \begin{bmatrix} SL_P & * & \dots & * & * \\ 0 & * & \dots & * & * \\ \dots & & & & \\ 0 & * & \dots & * & * \\ 0 & * & \dots & * & * \end{bmatrix} \quad (4.89)$$

□

Παρατήρηση 4.1.26. Παρατηρούμε ότι ο LM_{mC} έχει το ίδιο χαρακτηριστικό πολυώνυμο με τον $SL_P(I) \oplus E$.

Παρατήρηση 4.1.27. Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων ο LM_{mC} είναι ένας αραιός πίνακας για μεγάλο m . Χωρίς βλάβη της γενικότητας, υποθέτουμε ότι έχουμε ένα μεγαλύτερο κελί mC τέτοιο ώστε $2m + 1 \geq \max\{k_x, k_y, k_z\}$. Πιο συγκεκριμένα, υποθέτουμε ότι $2m + 1 = w_x k_x + w'_x$, $2m + 1 = w_y k_y + w'_y$ και $2m + 1 = w_z k_z + w'_z$, όπου $w'_x < k_x, w'_y < k_y, w'_z < k_z$ και $w_x, w_y, w_z \in \mathbb{N}$. Ξανά υπάρχουν $(2m + 1)^3$ γεννήτορες αλυσίδες στο mC . Τότε ισχύει το παρακάτω:

$$SL_P(I^{(h)}) = sl(I_1) := s \quad (4.90)$$

$$LK_P(I^{(h'_1, h'_2, h'_3)}, I^{(h'_4, h'_5, h'_6)}) = LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, I^{(h_4, h_5, h_6)}), \quad (4.91)$$

για $(h'_1, h'_2, h'_3) = (h_1, h_2, h_3) + (v_1, v_2, v_3)$, $(h'_4, h'_5, h'_6) = (h_4, h_5, h_6) + (v_4, v_5, v_6)$, και τελικά

$$LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, I^{(h_4, h_5, h_6)}) = 0, \quad h_4 - h_1 > k_x, h_5 - h_2 > k_y, h_6 - h_3 > k_z \quad (4.92)$$

Άρα μπορεί να υπάρχουν έως $(2k_x + 1)(2k_y + 1)(2k_z + 1) = k''$ διαφορετικές τιμές για το $LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, I^{(h_4, h_5, h_6)})$, έστω $l_1, l_2, \dots, l_{k''}$, και για κάθε ζεύγος $I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_4, h_5, h_6} = I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_1+v_1, h_2+v_2, h_3+v_3}$, υπάρχει ένα ζεύγος $I^{h_1, h_2, h_3}, I^{(h_1-v_1, h_2-v_2, h_3-v_3)}$ με την ίδια σχετική θέση. Ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης μπορεί να εκφραστεί σαν

$$SL_P(I^{(1)}) = Sl(I_1) + \sum_{1 \leq j \leq k''} 2l_j \quad (4.93)$$

Ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης θα έχει την μορφή:

$$LM_{mC} = \begin{bmatrix} s & l_1 & \dots & l_{k''} & 0 & \dots & 0 & l_{k''} & \dots & l_1 \\ l_1 & s & l_1 & \dots & l_{k''} & 0 & \dots & 0 & \dots & l_2 \\ l_2 & l_1 & s & l_1 & \dots & l_{k''} & 0 & \dots & l_{k''} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & l_{k''} & \dots & l_1 & s & l_1 & \dots & l_{k''} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & l_{k''} & \dots & 0 & l_{k''} & \dots & l_1 & s & l_1 & l_2 \\ l_2 & \dots & l_{k''} & \dots & 0 & l_{k''} & \dots & l_1 & s & l_1 \\ l_1 & \dots & l_{k''} & 0 & \dots & 0 & l_{k''} & \dots & l_1 & s \end{bmatrix} \quad (4.94)$$

που είναι ο πίνακας του οποίου τα στοιχεία της i -στής γραμμής θα είναι $l_{ii} = s, l_{i,(i-d) \bmod m} = l_d, l_{i,(i+d) \bmod m} = l_d$ για $d = 1, \dots, k$ και $l_{ij} = 0$ σε κάθε άλλη περίπτωση.

4.1.2.2 n κλειστές αλυσίδες σε ένα κελί με δύο ή τρεις ΠΣΣ

Ας θεωρήσουμε n αλυσίδες, έστω I, J, \dots, W σε ένα σύστημα με τρεις ΠΣΣ. Τα αποτελέσματά μας ισχύουν ομοίως και στην περίπτωση δύο ΠΣΣ. ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης αυτού του συστήματος είναι διάστασης $n \times n$,

$$LM_C = \begin{bmatrix} SL_P(I) & LK_P(I, J) & \dots & LK_P(I, W) \\ LK_P(I, J) & SL_P(J) & \dots & LK_P(J, W) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ LK_P(I, W) & LK_P(J, W) & \dots & SL_P(W) \end{bmatrix} \quad (4.95)$$

Έστω ότι συγκολλούμε $(2m+1)^3$ κελιά, τότε υπάρχουν $(2m+1)^3 n$ ελεύθερες αλυσίδες. Κάθε $(2m+1)^3$ ελεύθερες αλυσίδες των οποίων οι εικόνες στο περιοδικό σύστημα περιέχονται στις εικόνες μίας ελεύθερης αλυσίδας του κελιού C , ομαδοποιούνται σε διαδοχικές σειρές και κολώνες του περιοδικού πίνακα περιέλιξης LM_{mC} .

Πρόταση 4.1.28. Έστω C ένα κελί με τρεις ΠΣΣ που αποτελείται από n αλυσίδες. Έστω mC το κελί που δημιουργείται αφού κολλήσουμε $(2m+1)^3$ αντίγραφα του C ώστε να δημιουργήσουμε ένα μεγαλύτερο κελί σε τρεις ΠΣΣ του οποίου οι x, y και z διαστάσεις είναι $(2m+1)C$, τότε το άθροισμα όλων των όρων κάθε σειράς $(u-1)(2m+1)^3 + v, v = 1, \dots, k$ του LM_{mC} ισούται με το άθροισμα της u -στής σειράς του LM_C , για κάθε m .

Απόδειξη. Ας υπολογίσουμε το συνολικό άθροισμα των στοιχείων της πρώτης σειράς: Το άθροισμα των πρώτων $(2m+1)^3$ στοιχείων ισούται με $SL_P(I)$:

$$\begin{aligned}
& SL_P(I^{(0,0,0)}) + LK_P(I^{(0,0,0)}, I^{(1,0,0)}) + \dots + LK_P(I^{(0,0,0)}, I^{(-m,-m,-m)}) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&+ \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, (I_1 + L_{Cb}(1, 0, 0)) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) + \\
&+ \dots + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, (I_1 + L_{Cb}(-m, -m, -m)) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&+ \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}((2m+2)u_1, (2m+1)u_2, (2m+1)u_3)) + \\
&+ \dots + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) = SL_P(I)
\end{aligned} \tag{4.96}$$

Το άθροισμα των επόμενων $(2m+1)^3$ στοιχείων είναι $LK_P(I, J)$:

$$\begin{aligned}
& LK_P(I^{(0,0,0)}, J^{(0,0,0)}) + LK_P(I^{(0,0,0)}, J^{(1,0,0)}) + \dots + LK_P(I^{(0,0,0)}, J^{(-m,-m,-m)}) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&+ \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, (J_1 + L(1, 0, 0)) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) + \\
&+ \dots + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, (J_1 + (-m, -m, -m)L(1, 0, 0)) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&+ \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + L_{Cb}((2m+2)u_1, (2m+1)u_2, (2m+1)u_3)) + \\
&+ \dots + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + (m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\
&= \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, J_1 + L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) = LK_P(I, J)
\end{aligned} \tag{4.97}$$

Ομοίως για όλα τα σύνολα των $(2m+1)^3$ επόμενων στοιχείων.

Άρα τελικά το άθροισμα των στοιχείων της πρώτης σειράς του LM_{mC} , είναι

$$SL_P(I) + LK_P(I, J) + \dots + LK_P(I, W) \tag{4.98}$$

που ισούται με το άθροισμα των στοιχείων της πρώτης σειράς του LM_C .

Είναι

$$\begin{aligned} SL_P(I^{(0,0,0)}) &= SL_P(I^{(1,0,0)}) = \dots = SL_P(I^{(-m,-m,-m)}) \\ &= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_{mu}) \\ &= Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \end{aligned} \quad (4.99)$$

αφού $Sl(I_1)$ είναι το ίδιο για κάθε εικόνα I_u , και όλες οι εικόνες $I_i + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)$ και I_i είναι στις ίδιες σχετικές θέσεις όπως η $I_1 + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)$ σε σχέση με την I_1 . Ομοίως για όλες τις αλυσίδες $J^{(0,0,0)}, \dots, J^{(-m,-m,-m)}$ χλπ.

Επίσης είναι

$$\begin{aligned} LK_P(I^{h_1, h_2, h_3}, J^{h_4, h_5, h_6}) \\ = \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h_1, h_2, h_3}, J^{h_4, h_5, h_6} + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \end{aligned} \quad (4.100)$$

και

$$\begin{aligned} LK_P(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, J^{h'_4, h'_5, h'_6}) \\ = \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, J^{h'_4, h'_5, h'_6} + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \\ = \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I^{h'_1, h'_2, h'_3} + L_{Cb}(v_1, v_2, v_3), J^{h'_4, h'_5, h'_6} \\ + L_{Cb}(v_1, v_2, v_3) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)) \end{aligned} \quad (4.101)$$

Όμως οι $I^{h_1, h_2, h_3}, J^{h_4, h_5, h_6} + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)$ είναι στην ίδια σχετική θέση όπως οι $I^{h_1, h_2, h_3} + L_{Cb}(v_1, v_2, v_3), J^{h_4, h_5, h_6} + L_{Cb}(v_1, v_2, v_3) + (2m+1)L_{Cb}(u_1, u_2, u_3)$, άρα $LK_P(I^{h'_1, h'_2, h'_3}, J^{h'_4, h'_5, h'_6}) = LK_P(I^{h_1, h_2, h_3}, J^{h_4, h_5, h_6})$.

Άρα έχουμε $LK_P(I^{(0,0,0)}, J^{(0,0,0)}) = LK^P(I^{(1,0,0)}, J^{(1,0,0)})$, χλπ.

Άρα εάν $(h'_1, h'_2, h'_3) = (h_1, h_2, h_3) + (v_1, v_2, v_3)$ όπου $(h'_4, h'_5, h'_6) = (h_4, h_5, h_6) + (v_1, v_2, v_3)$, είναι

$$LK_P(I^{(h'_1, h'_2, h'_3)}, J^{(h'_4, h'_5, h'_6)}) = LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, J^{(h_4, h_5, h_6)}) \quad (4.102)$$

Άρα το άθροισμα των στοιχείων των πρώτων $(2m+1)^3$ σειρών ισούται με

$$SL_P(I) + LK_P(I, J) + \dots + LK_P(I, W) \quad (4.103)$$

Το ίδιο ισχύει για όλα τα ζεύγη $I^{(i_1, i_2, i_3)}, \dots, W^{(u_1, u_2, u_3)}$. Ομοίως, για το άθροισμα μίας σειράς $(u-1)(2m+1)^3 + v$ του LM_{kC} είναι

$$SL_P(U) + LK_P(I, U) + \dots + LK_P(U, W) \quad (4.104)$$

□

Παρατήρηση 4.1.29. (1) Αυτό δείχνει ότι η συνολική περιέλιξη που εφαρμόζεται σε μία αλυσίδα είναι σταθερή, ανεξάρτητη από το μέγεθος του κελιού.

(2) Το συνολικό άθροισμα των στοιχείων του πίνακα περιέλιξης εξαρτάται γραμμικά από το μέγεθος του κελιού. Έστω $Total(LM_C)$ το συνολικό άθροισμα των στοιχείων του περιοδικού πίνακα περιέλιξης LM_C . Τότε, είναι $Total(LM_{mC}) = (2m+1)Total(LM_C) = (2m+1)SL(I)$.

(3) Ο LM_{mC} είναι ένας κυκλικός πίνακας.

Πρόταση 4.1.30. Θεωρούμε n ελεύθερες αλυσίδες στο περιοδικό σύστημα ενός κελιού με τρεις ΠΣΣ. Τότε για τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης L_{mC} του περιοδικού συστήματος που παράγεται από ένα μεγαλύτερο κελί φτιαγμένο από $(2m+1)^3$ συγκολλημένα κελιά ακμής $(2m+1)C$, mC , έχουμε

$$L_{mC} = \begin{bmatrix} L_C & D \\ 0 & E \end{bmatrix} \quad (4.105)$$

όπου ο D έχει μέγεθος $n \times ((2m+1)^3 - 1)n$ και ο E έχει μέγεθος $((2m+1)^3 - 1)n \times ((2m+1)^3 - 1)n$.

Απόδειξη. Παρατηρούμε ότι μπορούμε να δούμε τον πίνακα περιέλιξης σαν έναν μπλόκ πίνακα του οποίου τα στοιχεία είναι πίνακες μεγέθους $(2m+1)^3 \times (2m+1)^3$, ως εξής:

$$LM_{mC} = \begin{bmatrix} LM_{1,1} & LM_{1,2} & \dots & LM_{1,nm} \\ LM_{1,2} & LM_{2,2} & \dots & LM_{2,nm} \\ \vdots & & & \\ LM_{1,nm} & LM_{2,nm} & \dots & LM_{nm,nm} \end{bmatrix} \quad (4.106)$$

Οι διαγώνιοι πίνακες, έστω $LM_{1,1}$, αφορούν την περιέλιξη των γεννητόρων αλυσίδων που είναι εικόνες της ίδιας γεννητόρου αλυσίδας, έστω I , στο αρχικό κελί C . Παρατηρούμε ότι ο πίνακας $LM_{1,1}$ είναι ακριβώς ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης του κελιού C_I που δημιουργείται από το κελί C εάν αγνοήσουμε όλες τις γεννήτορες αλυσίδες ακτός της i .

Εάν πολλαπλασιάσουμε τον $LM_m C$ με τους πίνακες $Q' = Q \oplus Q \oplus \dots \oplus Q$, όπου Q και Q^{-1} είναι γινόμενα απλών πινάκων, όπως στο Λήμμα 4.1.15, όπου υπάρχουν n ευθέα αθροίσματα, και $(Q')^{-1}Q^{-1} \oplus Q^{-1} \oplus \dots \oplus Q^{-1}$, υπολογίζουμε τα στοιχεία του πίνακα $(Q')^{-1}LM_m C Q'$ ως εξής:

Πρώτα για τα διαγώνια στοιχεία έχουμε

$$[(Q')^{-1}LM_m C Q']_{ii} = \sum_{1 \leq u \leq n} (Q')_{i,u}^{-1} \sum_{1 \leq v \leq n} LM_{u,v} Q'_{v,j} \quad (4.107)$$

Έχουμε ότι $Q'_{v,j} = 0$ εάν $v \neq j$, και $Q'_{j,j} = Q$. Όμοια, $(Q')_{v,j}^{-1} = 0$ εάν $v \neq j$, και $(Q')_{j,j}^{-1} = Q^{-1}$ αφού είναι

$$[Q^{-1}LM_m C Q]_{ij} = (Q')_{i,i}^{-1} LM_{u,j} Q'_{j,j} = Q^{-1} LM_{i,j} Q \quad (4.108)$$

Τότε για τα διαγώνια στοιχεία, δείξαμε στην απόδειξη της Πρότασης 4.1.30 ότι

$$Q^{-1}LM_{i,i}Q = \begin{bmatrix} SL_P & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & & & \\ 0 & * & \dots & * \end{bmatrix} \quad (4.109)$$

για $i \neq j$, τότε στην απόδειξη του Λήμματος 4.1.28 αποδείξαμε ότι το άθροισμα όλων των στοιχείων μίας σειράς του $LM_{i,j}$ ισούται με $LK_P(I, J)$. Τότε υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} [Q^{-1}LM_{i,j}Q]_{u,v} &= \sum_{1 \leq s \leq m} [Q^{-1}]_{u,s} \left[\sum_{1 \leq t \leq m} [LM_{i,j}]_{v,t} [Q]_{t,s} \right] \\ &= \sum_{1 \leq s \leq m} [Q^{-1}]_{u,s} \left[\sum_{s \leq t \leq m} [LM_{i,j}]_{v,t} [Q]_{t,s} \right] = \sum_{v \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{s,v} - \sum_{v \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{s+1,v} \quad (4.110) \\ &= \sum_{v \leq s \leq m} ([LM_{i,j}]_{s,v} - [LM_{i,j}]_{s+1,v}) \end{aligned}$$

όπου παρατηρήσαμε ότι $Q_{t,s} = 0$ για $t < s$, και $Q_{ts} = 1$ για $t \geq s$. Επίσης είναι $Q_{t,s}^{-1} = 0$ για κάθε $s \neq t-1, t$ και $Q_{t,t-1}^{-1} = -1, Q_{t,t}^{-1} = 1$.

Άρα, για $u > 1, v = 1$, από το Λήμμα 4.1.28 έχουμε:

$$\begin{aligned} [Q^{-1}LM_{i,j}Q]_{u1} &= \sum_{1 \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{u,s} - \sum_{1 \leq s \leq m} [LM_{i,j}]_{u+1,s} \quad (4.111) \\ &= LK_P(I, J) - LK_P(I, J) = 0 \end{aligned}$$

Άρα έχουμε αποδείξει ότι είναι

$$Q^{-1}LM_{i,j}Q = \begin{bmatrix} LK_P & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & & & \\ 0 & * & \dots & * \end{bmatrix} \quad (4.112)$$

Άρα έχουμε

$$(Q')^{-1}LM_{mC}Q' = \begin{bmatrix} SL_P(I) & * & \dots & LK_P(I, J) & * & \dots & LK_P(I, W) & * & \dots \\ 0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\ \dots & & & & & & & & \\ 0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\ LK_P(I, J) & * & \dots & SL_P(J) & * & \dots & LK_P(J, W) & * & \dots \\ 0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\ \dots & & & & & & & & \\ \dots & & & & & & & & \\ LK_P(I, W) & * & \dots & LK_P(J, W) & * & \dots & SL_P(W) & * & \dots \\ 0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \\ \dots & & & & & & & & \\ 0 & * & \dots & 0 & * & \dots & 0 & * & \dots \end{bmatrix} \quad (4.113)$$

Τότε αυτός ο πίνακας είναι όμοιος με τον παρακάτω πίνακα

$$\begin{aligned}
& LM_{mC} \sim \\
& \begin{bmatrix}
SL_P(I) & LK_P(I, J) & \dots & LK_P(I, W) & * & \dots & * & \dots \\
LK_P(I, J) & SL_P(J) & \dots & LK_P(J, W) & * & \dots & * & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
LK_P(I, W) & LK_P(J, W) & \dots & SL_P(W) & * & \dots & * & \dots \\
0 & 0 & \dots & 0 & * & \dots & * & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & 0 & \dots & 0 & * & \dots & * & \dots
\end{bmatrix} \\
& \sim \begin{bmatrix}
LM_C & * & \dots & * & \dots \\
0 & * & \dots & * & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & * & \dots & * & \dots
\end{bmatrix} \tag{4.114}
\end{aligned}$$

□

Παρατήρηση 4.1.31. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, υποθέτουμε ότι έχουμε ένα μεγαλύτερο κελί mC τέτοιο ώστε $2m + 1 \geq \max\{(k_x)_i, (k_y)_i, (k_z)_i\}$. Πιο συγκεκριμένα, ας υποθέσουμε ότι $2m + 1 = (w_x)_i(k_x)_i + (w_x)'_i = (w_y)_i(k_y)_i + (w_y)'_i = (w_z)_i(k_z)_i + (w_z)'_i$, όπου $(w_x)'_i < (k_x)_i, (w_y)'_i < (k_y)_i, (w_z)'_i < (k_z)_i$ και $(w_x)_i, (w_y)_i, (w_z)_i \in \mathbb{N}$. Ξανά υπάρχουν $(2m + 1)^3$ γεννήτορες αλυσίδες στο mC . Αυτές ανήκουν τώρα σε $((w_x)_i(k_x)_i + 1)((w_y)_i(k_y)_i + 1)((w_z)_i(k_z)_i + 1)$ ελεύθερες αλυσίδες οι εικόνες των οποίων στο mC είναι εντελώς ξεδιπλωμένες, και σε $(2m + 1)^3 - ((w_x)_i(k_x)_i + 1)((w_y)_i(k_y)_i + 1)((w_z)_i(k_z)_i + 1)$ ελεύθερες αλυσίδες που ακουμπούν το κελί. Τότε ισχύει το παρακάτω:

$$\begin{aligned}
& SL_P(I^{(0,0,0)}) = SL_P(I^{(1,0,0)}) = \dots = SL_P(I^{(-m,-m,-m)}) \\
& = Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_{k_1 u}) \\
& = Sl(I_1) + \sum_{u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}} L(I_1, I_1 + (2m + 1)L(u_1, u_2, u_3))
\end{aligned} \tag{4.115}$$

$$SL_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}) = sl(I_1) := s, \quad \text{if } k < m \tag{4.116}$$

$$LK_P(I^{(h'_1, h'_2, h'_3)}, I^{(h'_4, h'_5, h'_6)}) = LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, I^{(h_4, h_5, h_6)}), \tag{4.117}$$

όταν $(h'_4, h'_5, h'_6) - (h'_1, h'_2, h'_3) = (h_4, h_5, h_6) - (h_1, h_2, h_3)$.

$$LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, I^{(h_4, h_5, h_6)}) = 0, \quad \|(h_4, h_5, h_6) - (h_1, h_2, h_3)\| > \|(k_x, k_y, k_z)_i\| \quad (4.118)$$

$$LK_P(I^{(h'_1, h'_2, h'_3)}, J^{(h'_4, h'_5, h'_6)}) = LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, J^{(h_4, h_5, h_6)}) \quad (4.119)$$

όταν $(h_1, h_2, h_3) - (h'_1, h'_2, h'_3) = (h_4, h_5, h_6) - (h'_4, h'_5, h'_6)$

$$LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, J^{(h_4, h_5, h_6)}) = 0, \quad (4.120)$$

όταν $\|(h_4, h_5, h_6) - (h_1, h_2, h_3)\| > \max\{\|(k_x, k_y, k_z)_i\|, \|(k_x, k_y, k_z)_j\|\}$. Άρα μπορεί να υπάρχουν έως $k_i = (k_x)_i (k_y)_i (k_z)_i$ διαφορετικές τιμές για το $LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, I^{(h_4, h_5, h_6)})$, έστω l_1, l_2, \dots, l_{k_i} , και για κάθε ζεύγος $I^{h_1, h_2, h_3}, I^{h_4, h_5, h_6}$, υπάρχει ένα ζεύγος $I^{h_1, h_2, h_3}, I^{-h_4, -h_5, -h_6}$ με την ίδια σχετική θέση. Επίσης, μπορεί να υπάρχουν μέχρι $k_{ij} = \max\{k_i, k_j\}$ διαφορετικές τιμές για το $LK_P(I^{(h_1, h_2, h_3)}, J^{(h_4, h_5, h_6)})$, έστω $ij_1, ij_2, \dots, ij_{k_{ij}}$. Ο περιοδικός αριθμός αυτο-περιέλιξης μπορεί να γραφτεί σαν

$$SL_P(I^{(0,0,0)}) = Sl(I_1) + \sum_{1 \leq u \leq k_i} 2i_u \quad (4.121)$$

και ο περιοδικός αριθμός περιέλιξης $LK_P(I, J)$ μπορεί να γραφτεί σαν

$$LK_P(I^{(k_1, k_2, k_3)}, J^{(h_1, h_2, h_3)}) = \sum_{1 \leq u \leq k_{ij}} ij_u \quad (4.122)$$

4.2 Γραφήματα πινάκων περιέλιξης

Σε αυτή την παράγραφο προτείνουμε να χρησιμοποιήσουμε γραφήματα για να μελετήσουμε την διαπλοκή πολυμερικών τηγμάτων.

Σε έναν γράφο με βάρη G αντιστοιχεί μία συνάρτηση βάρους $w : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ που ικανοποιεί τις σχέσεις $w(u, v) = w(v, u)$ και $w(u, u) \geq 0$. Παρατηρούμε ότι εάν $\{u, b\} \notin E(G)$, τότε $w(u, v) = 0$. Αναπαριστούμε έναν γράφο με βάρη ως εξής: Αναπαριστούμε κάθε αλυσίδα στο τήγμα με μία κορυφή. Τότε δύο κορυφές συνδέονται με μία ακμή εάν ο απόλυτος αριθμός περιέλιξης τους είναι μεγαλύτερος του μηδενός. Επίσης, υπάρχει μία ακμή από μία κορυφή στον εαυτό της εάν η αλυσίδα έχει απόλυτο αριθμό αυτο-περιέλιξης διάφορο του μηδενός. Άρα έχουμε

συσχετίσει ένα τήγμα πολυμερούς με ένα γράφημα. Τότε σε κάθε ακμή αυτού του γραφήματος αντιστοιχεί μία συνάρτηση βάρους που ορίζεται ως $w(u, v) = |L(u, v)|$ και $w(u, u) = |Sl(u)|$.

Σε ένα μη ομοιογενές τήγμα, υπάρχουν περιοχές όπου τα τοπολογικά εμπόδια είναι πιο πυκνά, ή είναι πιο επίμονα. Η ύπαρξη μή ομοιογενούς διαπλοκής στο τήγμα μπορεί να επηρεάζει τις ιδιότητές του. Πράγματι, τα αποτελέσματα της ανομοιογένειας της διαπλοκής των πολυμερών έχουν παρατηρηθεί σε πειράματα [12]. Θα δούμε ότι η ομοιογένεια της διαπλοκής ενός τήγματος πολυμερούς μπορεί να συσχετιστεί με την συνεκτικότητα του αντίστοιχου γραφήματος με βάρη. Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε την ιδιαίτερη περίπτωση που όλες οι, έστω n , αλυσίδες είναι αυτο-πεπλεγμένες αλλά δεν είναι καθόλου πεπλεγμένες με τον εαυτό τους. Τότε προφανώς ο πίνακας περιέλιξης θα είναι ένας διαγώνιος πίνακας, και το τήγμα αποτελείται από n απομονωμένες αλυσίδες. Άρα, το αντίστοιχο γράφημα με βάρη θα είναι μη συνεκτικό και το πλήθος των συνιστωσών του είναι n . Γενικά, εάν ο πίνακας περιέλιξης έχει την μορφή ενός μπλόκ πίνακα, τότε υπάρχουν συλλογές αλυσίδων που είναι πεπλεγμένες μεταξύ τους αλλά όχι με τις αλυσίδες που ανήκουν στις άλλες συλλογές. Δηλαδή, υπάρχουν απομονωμένες συλλογές αλυσίδων. Παρατηρούμε ότι το αντίστοιχο γράφημα είναι επίσης μη συνεκτικό και το πλήθος των συνιστωσών του είναι ίσο με το πλήθος των συλλογών.

Σε αυτά τα απλά παραδείγματα, παρατηρούμε ότι η ιδιότητα της ανομοιογένειας μπορεί να ανιχνευθεί από τον πίνακα περιέλιξης ελέγχοντας εάν έχει μπλόκ διαγώνια μορφή. Επίσης παρατηρούμε ότι για να το ανιχνεύσουμε αυτό θα αρκούσε να αντικαταστήσουμε όλα τα $w(u, v)$ με 1 εάν $w(u, v) \neq 0$, που θα μας έδινε έναν πίνακα γειτνίασης του γραφήματος. Αλλά παρατηρούμε ότι στην περίπτωση της εφαρμογής σε γραμμικά πολυμερή (ανοικτές αλυσίδες), τότε ο πίνακας περιέλιξης μπορεί να μην έχει μηδενικούς όρους, ακόμα και εάν οι αλυσίδες δεν βάζουν εμπόδια η μία στην άλλη. Τότε χρησιμοποιώντας τον πίνακα γειτνίασης δεν θα έδειχνε σημάδια ανομοιογένειας, ακόμα και αν κάποια από τα στοιχεία του είναι πολύ μικρότερα από τα άλλα. Κανείς μπορεί να επιβάλλει ένα όριο στα στοιχεία του πίνακα έτσι ώστε να λάβει υπόψη μόνο τους πιο σημαντικούς βαθμούς διαπλοκής και να αγνοήσει τον θόρυβο των δεδομένων. Επίσης, παρατηρούμε ότι μπορεί να υπάρχει μία αλυσίδα στο τήγμα την οποία εάν αγνοούσαμε, ο πίνακας περιέλιξης θα γινόταν μπλόκ διαγώνιος. Άρα το πρόβλημα είναι να βγάλουμε όσο το δυνατόν λογότερα από το γράφημα ώστε να διαχωρίσουμε ένα υποσύνολο ενός επιθυμητού μεγέθους. Σε ένα γράφημα, ένα υποσύνολο των ακμών που εάν αγνοηθεί κάνει τον γράφο μη συνεκτικό ονομάζεται *κόψιμο*. Τα κοψίματα συναντώνται φυσικά στην μελέτη της συνεκτικότητας των γραφημάτων όπου τα μεγέθη των μη συνεκτικών τμημάτων δεν μας ενδιαφέρουν. Τα ισοπεριμετρικά προβλήματα εξετάζουν βέλτιστες σχέσεις μεταξύ του μεγέθους του κοψίματος και των μεγεθών των μη συνεκτικών τμημάτων. Γενικά, τα ισοπεριμετρικά προβλήματα που αφορούν κοψίματα αντιστοιχούν με φυσικό τρόπο στις σταθερές του Cheeger.

Ο βαθμός μίας κορυφής v ορίζεται ως:

$$d_v = \sum_u w(u, v) \quad (4.123)$$

$$\text{vol}G = \sum_v d_v \quad (4.124)$$

Για δύο σύνολα μη συννεκτικά, έστω A και B , του V , έστω $E(A, B)$ το σύνολο των ακμών με μία κορυφή στο A και μία κορυφή στο B . Για ένα υποσύνολο $x \subset V$, ορίζουμε

$$h_G(X) = \frac{|E(X, \bar{X})|}{\min(\sum_{x \in X} d_x, \sum_{y \in \bar{X}} d_y)} \quad (4.125)$$

όπου \bar{X} είναι το συμπλήρωμα του X . Η σταθερά του Cheeger ενός γραφήματος G ορίζεται ως

$$h_G = \min_X h_G(X) \quad (4.126)$$

Για ένα υποσύνολο X κορυφών του V , θεωρούμε $N(X) = \{v \notin X : v \sim u \in X\}$.

Ορίζουμε

$$g_G(X) = \frac{\text{vol}(N(X))}{\min(\text{vol}(X), \text{vol}(\bar{X}))} \quad (4.127)$$

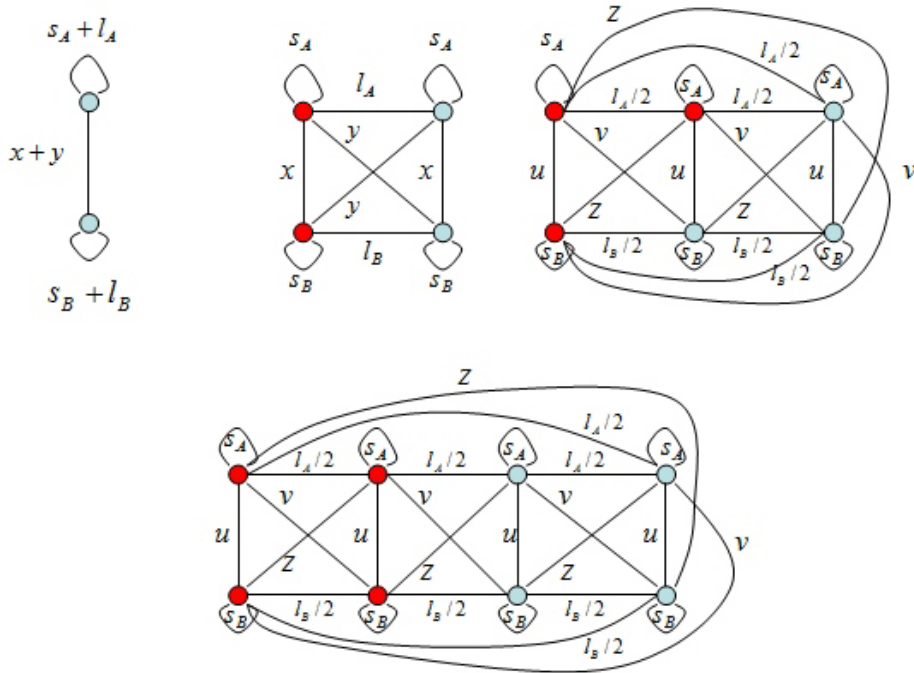
και

$$g_G = \min_X g_G(X) \quad (4.128)$$

Σημειώνουμε ότι το g_G αφορά την διάπλωση κορυφών ενός γραφήματος. (Οι διαπλωτές είναι γραφήματα που έχουν την ιδιότητα ότι κάθε υποσύνολο κορυφών (που δεν είναι πολύ μεγάλο) είναι γειτονικό με πολλές κορυφές. Αυτή η ιδιότητα ονομάζεται *ιδιότητα διάπλωσης*. Τέτοια γραφήματα έχουν πολλές εφαρμογές.)

4.2.1 Η σταθερά του Cheeger για περιοδικά γραφήματα

Το περιοδικό σύστημα αντιστοιχεί σε ένα άπειρο περιοδικό γράφημα [25]. Με τον ορισμό του περιοδικού αριθμού περιέλιξης ανάγουμε την μελέτη του άπειρου περιοδικού γραφήματος σε ένα πεπερασμένο γράφημα με βάρη. Άρα για το κελί mC που έχει mn γεννήτορες αλυσίδες, το αντίστοιχο γράφημα, έστω mG , θα έχει mn κορυφές. Γνωρίζουμε ότι τα κελιά C και mC παράγουν το ίδιο περιοδικό σύστημα, αλλά τα αντίστοιχα γραφήματα, G και mG είναι διαφορετικά. Θα μελετήσουμε την εξάρτηση της σταθεράς του Cheeger ως προς το μέγεθος του κελιού.



Σχήμα 4.6: Δύο αλυσίδες σε ένα σύστημα με μία ΠΣΣ, όπου και οι δύο αλυσίδες ξεδιπλώνουν σε δύο κελιά. Τα σύμβολα s_A, l_A, x, y, u, v, z είναι όπως το Παράδειγμα 2 στην Παράγραφο 4.1.1.2. Τα γραφήματα αντιστοιχούν στα κελιά $C, 2C, 3C$ και $4C$ αντίστοιχα. Για κάθε κελί, θεωρούμε τα δύο σύνολα κορυφών $Y = \{\text{κόκκινες κορυφές}\}$ και $\bar{Y} = \{\text{μπλέ κορυφές}\}$. Τότε έχουμε ότι για κάθε μέγεθος κελιού είναι $h_G \leq h_G(Y) = O(1/k)$. Παρατηρούμε ότι το πλήθος των ακμών που συνδέουν τα δύο σύνολα κορυφών είναι $E(Y, \bar{Y})_{2C} = 4, E(Y, \bar{Y})_{3C} = 9, E(Y, \bar{Y})_{4C} = 8$ για κάθε γράφημα.

Πρόταση 4.2.1. [Η σταθερά του Cheeger για γραφήματα κλειστών αλυσίδων] Έστω C ένα κελί με μία ΠΣΣ. Τότε υπάρχει ένα m_0 έτσι ώστε εάν συγκολλήσουμε $m > m_0$ κελιά ώστε να δημιουργήσουμε ένα μεγαλύτερο κελί mC , είναι $h_{mG} = O(\frac{1}{m})$ για κάθε $m > m_0$.

Απόδειξη. Έστω $S(G) = (x_1, \dots, x_n)$ οι κορυφές του G . Αυτές αντιστοιχούν στις γεννήτορες αλυσίδες i_1, \dots, i_n . Έστω $k_{i_j}, j = 1, \dots, n$ το πλήθος των κελιών που τέμνει μία εικόνα μίας ελεύθερης αλυσίδας i_j . Έστω $m_0 = \max_j \{k_{i_j}\}$ και έστω $S_{m_0G} = (x_1^{(1)}, \dots, x_1^{(m_0)}, \dots, x_n^{(1)}, \dots, x_n^{(m_0)})$, οι κορυφές του m_0G . Αυτές οι κορυφές σχετίζονται με τις ελεύθερες αλυσίδες $(i_1^{(1)}, \dots, i_n^{(m_0)})$, με $i_h^{(l)} = i_h^{(1)} + (l, 0, 0)$. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, έστω ότι ο m_0 είναι ένας άρτιος αριθμός και έστω X το σύνολο κορυφών $(x_1^{(1)}, \dots, x_1^{(m/2)}, x_2^{(1)}, \dots, x_2^{(m/2)}, \dots, x_n^{(1)}, \dots, x_n^{(m/2)})$. Τότε

έχουμε:

$$h_{m_0G}(X) = \frac{|E(X, \bar{X})|}{\min\{\text{vol}(X), \text{vol}(\bar{X})\}} \quad (4.129)$$

Παρατηρείστε ότι εξορισμού της σταθεράς του Cheeger είναι $h_{m_0G} \leq h_{m_0G}(X) \leq 1$.

Όταν συγκολλούμε m κελιά τύπου m_0C , θα έχουμε mm_0n κορυφές. Τότε έστω $X' = (x_1^{(1)}, \dots, x_1^{(-mm_0/2)}, \dots, x_k^{(1)}, \dots, x_k^{(mm_0/2)})$ (δείτε Εικόνα 4.6 για την περίπτωση δύο αλυσίδων με $m_0 = 2$). Τότε το $|E(X', \bar{X}')|$ παραμένει σταθερό, αφού το μέγεθος του κελιού είναι τέτοιο ώστε οι νέες εικόνες στο κελί δεν διαπλέκονται με το \bar{X}' . Τότε από το Λήμμα 4.1.7 έχουμε το παρακάτω:

$$\begin{aligned} h_{mm_0G} \leq h_{mm_0G}(X') &= \frac{|E(X', \bar{X}')|}{\min\{X', \bar{X}'\}} \\ &= \frac{|E(X, \bar{X})|}{\min\{m \cdot \text{vol}(X), m \cdot \text{vol}(\bar{X})\}} = \frac{1}{m} h_{m_0G}(X) \end{aligned} \quad (4.130)$$

□

Παρατηρούμε ότι εάν οι αλυσίδες είναι ανοικτές, τότε το αντίστοιχο γράφημα είναι πλήρες, αφού ο αριθμός περιέλιξης μπορεί να μην είναι μηδέν ακόμα και εάν οι αλυσίδες είναι μακριά η μία από την άλλη.

Πρόταση 4.2.2. [*H σταθερά του Cheeger γραφημάτων ανοικτών αλυσίδων*] Έστω C το κελί με μία ΠΣΣ. Ας υποθέσουμε ότι συγκολλούμε $m > m_0$ κελιά ώστε να φτιάξουμε ένα μεγαλύτερο κελί mC . Τότε η σταθερά του Cheeger του γραφήματος mG είναι $h_{mG} = O(m)$.

Απόδειξη. Ας υποθέσουμε ότι τα m_0, X, X' ορίζοντας όπως στην απόδειξη της Πρότασης 4.2.1. Τότε είναι

$$\begin{aligned} h_{mm_0G} \leq h_{mm_0G}(X') &= \frac{|E(X', \bar{X}')|}{\min\{X', \bar{X}'\}} \\ &= \frac{m(m-1)/4 |E(X, \bar{X})|}{\min\{m \cdot \text{vol}(X), m \cdot \text{vol}(\bar{X})\}} = \frac{m-1}{4} h_{m_0G}(X) \end{aligned} \quad (4.131)$$

□

Παρατήρηση 4.2.3. Παρατηρούμε ότι εάν χρησιμοποιούμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης ή τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού για τους πίνακες περιέλιξης, τότε τα αντίστοιχα περιοδικά γραφήματα δεν θα είναι πλήρη και η Πρόταση 4.2.1 θα ισχύει και για κλειστές και για ανοικτές αλυσίδες.

Η σταθερά του Cheeger μπορεί να είναι πολύ δύσκολο να υπολογισθεί. Άρα για τις εφαρμογές, μπορεί να είναι καταλληλότερο να χρησιμοποιούμε την Λαπλασιανή ενός γραφήματος για να υπολογίσουμε εύκολα άνω και κάτω όρια της σταθερά του Cheeger. Η Λαπλασιανή ενός γραφήματος με βάρη είναι ο πίνακας:

$$\mathcal{L}(u, v) = \begin{cases} 1 - \frac{w(v,v)}{d_v} & u = v, d_v \neq 0 \\ -\frac{w(u,v)}{\sqrt{d_u d_v}} & u, v \text{ γειτονικές} \\ 0 & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (4.132)$$

Τότε για το φάσμα του \mathcal{L} είναι $0 = \lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$ [24].

Κανείς μπορεί να δώσει μία εκτίμηση για την σταθερά του Cheeger χρησιμοποιώντας την ανισότητα του Cheeger [24]:

$$2h_G \geq \lambda_2 \geq \frac{h_G^2}{2} \quad (4.133)$$

Επίσης, το παρακάτω αποτέλεσμα που αποδείχθηκε στο [24] παρέχει χρήσιμη πληροφορία σχετικά με τις ιδιοτιμές του \mathcal{L} :

Λήμμα 4.2.4. Για ένα γράφημα G n κορυφών, έχουμε
(i)

$$\sum_i \lambda_i \leq n \quad (4.134)$$

όπου η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το G δεν έχει απομονωμένες κορυφές.

(ii) Για $n \geq 2$,

$$\lambda_1 \leq \frac{n}{n-1} \quad (4.135)$$

όπου η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το G είναι το πλήρες γράφημα με n κορυφές. Επίσης, για ένα γράφημα G χωρίς απομονωμένες κορυφές, έχουμε

$$\lambda_{n-1} \geq \frac{n}{n-1} \quad (4.136)$$

(iii) Για ένα γράφημα που δεν είναι πλήρες, έχουμε $\lambda_1 \leq 1$

(iv) Εάν το G είναι συνεκτικό, τότε $\lambda_1 > 0$. Εάν $\lambda_i = 0$ και $\lambda_{i+1} \neq 0$, τότε το G έχει ακριβώς $i + 1$ συνεκτικές συστασές.

(v) Για κάθε $i \leq n - 1$, έχουμε

$$\lambda_i \leq 2 \quad (4.137)$$

με $\lambda_{n-1} = 2$ αν και μόνο αν μία συννεκτική συνιστώσα του G είναι διμερής και μή τετριμμένη.
(vi) Το φάσμα ενός γραφήματος είναι η ένωση των φασμάτων των συννεκτικών συνιστωσών του.

Άλλη μία ενδιαφέρουσα ποσότητα είναι το πλάτος ενός γραφήματος. Ένας συμμετρικός πίνακας έχει πλάτος w αν $(M)_{i,j} = 0$ για κάθε i, j με $|i - j| \geq w$. Το πλάτος $w(\Gamma)$ ενός γραφήματος Γ είναι το μικρότερο δυνατόν πλάτος για τον πίνακα γειτνιάσής του ή για τον πίνακα Laplace του. Η παρακάτω ανισότητα ποδεικνύεται στο [17]

Θεώρημα 4.2.5. Έστω $b = \lceil n \frac{\lambda_2}{\lambda_n} \rceil$, τότε

$$W(G) \geq \begin{cases} b & n - b \text{ άρτιος} \\ b - 1 & n - b \text{ περιττός} \end{cases} \quad (4.138)$$

Μία κλίκα σε ένα γράφημα είναι ένα σύνολο από ανά ζεύγη γειτνιάζουσες κορυφές. Μία *συνκλίκα* είναι σε ένα γράφημα είναι ένα σύνολο από μη γειτνιάζουσες ανά ζεύγη κορυφές. Ο αριθμός ανεξαρτησίας $\alpha(G)$ είναι το μέγεθος της μεγαλύτερης συνκλίκας στον G . Ισχύει το παρακάτω Θεώρημα [17]

Θεώρημα 4.2.6.

$$\alpha(G) \leq |\{i | \lambda_i \geq 0\}| \quad (4.139)$$

και

$$\alpha(G) \leq |\{i | \lambda_i \leq 0\}| \quad (4.140)$$

Παρατήρηση 4.2.7. Όπως εξηγήσαμε στην προηγούμενη Παράγραφο, ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης LM_{mC} γίνεται όλο και πιο αραιός καθώς το m αυξάνει. Πράγματι, η απόσταση μεταξύ των αλυσίδων στο κελί mC αυξάνει με το m και το πλήθος των αλυσίδων σε ένα κελί επίσης αυξάνει ανάλογα με το m (Λήμμα 4.1.1). Άρα, περιμένουμε ότι $\alpha(mG) = O(m)$.

4.3 Αριθμητικά αποτελέσματα

Σε αυτή την παράγραφο αναλύουμε αριθμητικά δεδομένα τυχαίων περιπάτων σε συστήματα με ΠΣΣ για διαφορετικά συστήματα. Υπολογίζουμε τους πίνακες περιέλιξης για όλα τα δείγματα και βρίσκουμε τις ιδιοτιμές τους. Επίσης, υπολογίζουμε την Λαπλασιανή των αντίστοιχων γραφημάτων και τις ιδιοτιμές της. Μελετάμε την αυξητική τάση αυτών των ιδιοτιμών και άλλων πιθανών μέτρων διαπλοκής ως προς το μέγεθος του κελιού.

Χρησιμοποιώντας τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης θα προσπαθήσουμε να ανιχνεύσουμε διαφορές στις ιδιότητες της διαπλοκής συστημάτων με διαφορετικές πυκνότητες, μοριακά βάρη, και διαφορετικούς βαθμούς ομοιογένειας. Για αυτό προτείνουμε να μελετήσουμε τα παρακάτω διαφορετικά συστήματα (δείτε Εικόνα 4.7):

(A) Τυχαίους περιπατους ίσου βήματος μήκους 100 σε ένα κελί με τρεις ΠΣΣ και πυκνότητα $\rho = 0.84$.

(B) Τυχαίους περιπατους ίσου βήματος μήκους 100 σε ένα κελί με τρεις ΠΣΣ και πυκνότητα $\rho = 0.5$.

(C) Τυχαίους περιπατους ίσου βήματος μήκους 200 σε ένα κελί με τρεις ΠΣΣ και πυκνότητα $\rho = 0.84$.

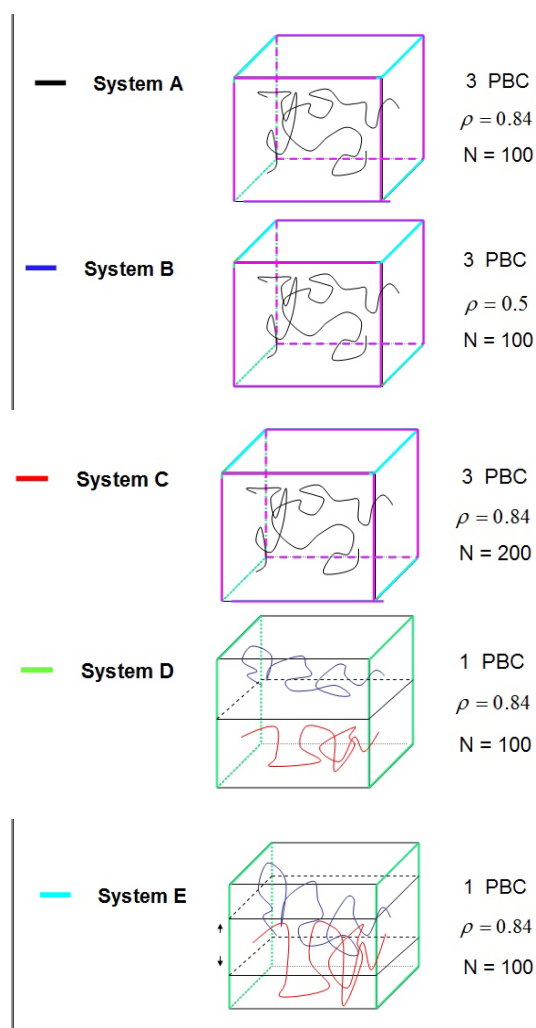
(D) Τυχαίους περιπατους ίσου βήματος μήκους 100 σε ένα κελί με μία ΠΣΣ(συμπιεσμένο) χωρισμένο σε δύο στρώσεις που δεν επικαλύπτονται σε πυκνότητα $\rho = 0.84$.

(E) Τυχαίους περιπατους ίσου βήματος μήκους 100 σε ένα κελί με μία ΠΣΣ (συμπιεσμένο) χωρισμένο σε δύο στρώσεις που επικαλύπτονται κατά 50% σε πυκνότητα $\rho = 0.84$.

Για αυτά τα συστήματα υπολογίζουμε τους τοπικούς περιοδικούς πίνακες προσομοίωσης για τις αντίστοιχες από άκρο εις άκρο κλειστές αλυσίδες. Για τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα περιέλιξης χρησιμοποιούμε τον τοπικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων, LKS . Υπενθυμίζουμε ότι τα αριθμητικά μας αποτελέσματα στην Παράγραφο 3.6 υπέδειξαν ότι το LKS διατηρεί την σχετική πληροφορία σε σχέση με τα τοπικά εμπόδια, παρόμοια με του LK , και δεν επηρεάζεται από την μεγάλη στρέψη και τη συστροφή των αλυσίδων ου μπορεί να επιβάλλουν απορροσανατολιστικό θόρυβο στα δεδομένα. Για κάθε πίνακα περιέλιξης υπολογίζουμε και τον Λαπλασιανό πίνακα του αντίστοιχου γραφήματος.

Για να ελέγξουμε τα αποτελέσματά μας στον περιοδικό πίνακα περιέλιξης ως προς το μέγεθος του κελιού (Προτάσεις 4.1.15,4.1.17,4.1.28,4.1.30 και 4.2.1) κάνουμε αυτή την ανάλυση για διαφορετικά μεγέθη κελιών που προσομοιώνουν το ίδιο σύστημα S . Παρατηρούμε ότι δεν συγκολλούμε το ίδιο κελί για να φτιάξουμε ένα καινούργιο, αλλά παράγουμε ένα νέο δείγμα του ίδιου συστήματος σε μεγαλύτερο κελί. Τότε θα ελέγξουμε εάν τα προηγούμενα αποτελέσματα ισχύουν κατά μέσο όρο για αυτά τα συστήματα. Για κάθε σύστημα σε κάθε μέγεθος κελιού τα δεδομένα που αναλύθηκαν αφορούν 100 δείγματα.

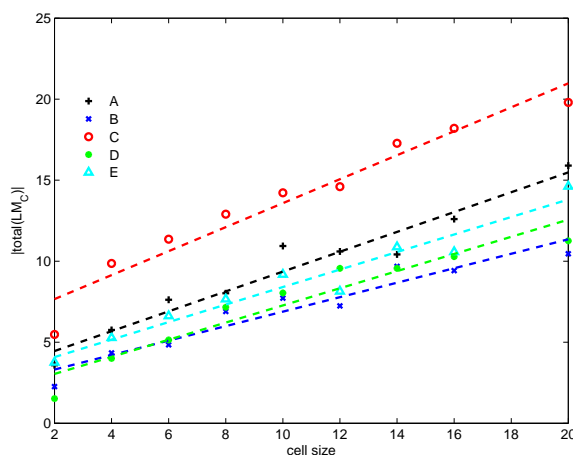
Επίσης, υπολογίζουμε τους πίνακες περιέλιξης για τα 80 δείγματα ΠΕ που μας παρήχε ο Χ. Τζουμανέκας τα οποία αναλύσαμε στην Παράγραφο 3.6, και τα συγκρίνουμε με τα δεδομένα των τυχαίων περιπάτων. Υπενθυμίζουμε ότι καθένα από αυτά τα δείγματα αφορά 8 αλυσίδες μήκους 1000 σε ένα κελί με τρεις ΠΣΣ σε πυκνότητα $\rho = 0.78g/cm^3$.



Σχήμα 4.7: Μελετάμε τα παρακάτω συστήματα τυχαίων περιπάτων ίσου μήκους βήματος: (A) μήκους $N = 100$, πυκνότητας $\rho = 0.84$ σε ένα κελί με τρεις ΠΣΣ, (B) μήκος $N = 100$, πυκνότητα $\rho = 0.5$ σε ένα κελί με τρεις ΠΣΣ, (C) μήκος $N = 200$, πυκνότητα $\rho = 0.84$ σε ένα κελί με τρεις ΠΣΣ, (D) μήκος $N = 100$, πυκνότητα $\rho = 0.84$ σε ένα κελί με μία ΠΣΣ, χωρισμένο σε δύο περιοχές, όπου οι μισές αλυσίδες κείτονται στην άνω περιοχή και οι μισές στην κάτω, και (E) μήκους $N = 100$, πυκνότητας $\rho = 0.84$ σε ένα κελί με μία ΠΣΣ, χωρισμένο σε δύο περιοχές που αλληλοεπικαλύπτονται κατά 50%.

4.3.1 Ανάλυση δεδομένων

Υπολογίζουμε πρώτα την μέση απόλυτη τιμή του αθροίσματος όλων των στοιχείων του πίνακα περιέλιξης ως προς όλες τις διαμορφώσεις σε κάθε μέγεθος κελιού. Συμβολίζουμε $|Total(LM_C)|$. Η Εικόνα 4.8 δείχνει το $\langle |Total(LM_C)| \rangle$ ως προς το μέγεθος του κελιού για όλα τα συστήματα. Παρατηρούμε ότι αυξάνει ανάλογα με το μέγεθος του κελιού, όπως αναμένεται από τα Λήμματα 4.1.7 και 4.1.28. Για κάθε σύστημα τα δεδομένα ακολουθούν μία συνάρτηση της μορφής $a * x + b$. Για το σύστημα (A): $a = 0.612484$, $b = 3.23239$, (B): $a = 0.446629$, $b = 2.4189$, (C): $a = 0.739565$, $b = 6.18445$, (D): $a = 0.52917$, $b = 1.98174$, (E): $a = 0.540258$, $b = 3.00181$. Παρατηρούμε ότι η κλίση είναι παρόμοια για όλα τα συστήματα αλλά η σταθερά b δείχνει μεγαλύτερη απόκλιση για τα διαφορετικά συστήματα. Είναι $b_D < b_B < b_E < b_A < b_C$. Παρατηρούμε ότι το σύστημα C δείχνει μεγαλύτερη απόκλιση από όλα τα άλλα συστήματα. Επίσης, η αντίστοιχη τιμή για τα δείγματα ΠΕ είναι $b_{PE} = 19$. Αυτό υπονοεί ότι οι τιμές των a και b εξαρτάται κυρίως από το μοριακό βάρος των αλυσίδων.



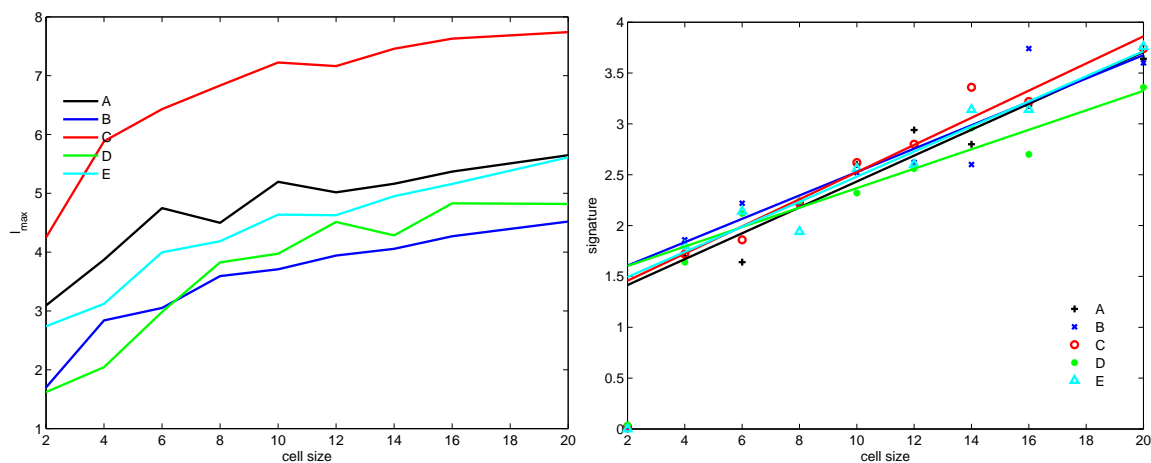
Σχήμα 4.8: Το μέσο απόλυτο συνολικό άθροισμα των στοιχείων του πίνακα ως προς όλες τις δυνατές διαμορφώσεις.

Στη συνέχεια, υπολογίζουμε την μέση απόλυτη ιδιοτιμή ως προς όλες τις διαμορφώσεις (Εικόνα 4.9(a)). Παρατηρούμε ότι από τις Προτάσεις 4.1.17 και 4.1.30 περιμένουμε ότι κάποιες από τις ιδιοτιμές του πίνακα παραμένουν ανεξάρτητες από το μέγεθος του κελιού, αλλά, όπως τα παραδείγματά μας στην Παράγραφο 3 επιβεβαιώνουν, η μέση μέγιστη ιδιοτιμή μπορεί να διαφέρει. Πράγματι, βλέπουμε ότι η μέγιστη ιδιοτιμή αυξάνει σε όλες τις περιπτώσεις. Παρατηρούμε μία παρόμοια αυξητική τάση για όλα τα συστήματα. Η ομοιότητα είναι πιο δυνατή για τα μη-περιορισμένα συστήματα (συστήματα A,B,C). Η διαφορά μεταξύ των συστημάτων A και B είναι

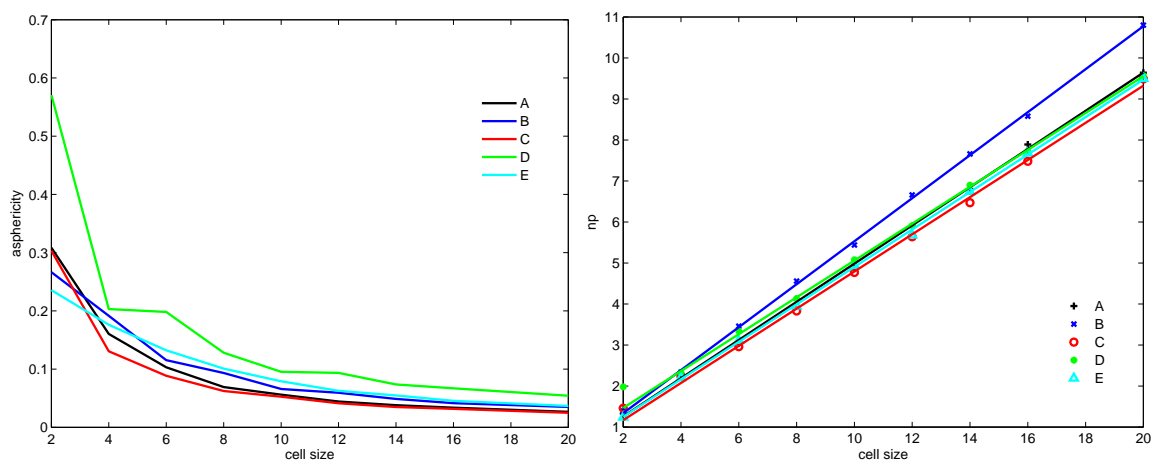
σε κάθε μήκος περίπου ίση με ένα. Η διαφορά μεταξύ του συστήματος C και των συστημάτων A και B είναι περίπου 2 και 3 αντίστοιχα. Η αντίστοιχη τιμή για τα δείγματα ΠΕ είναι 8.0756. Άρα η μεγαλύτερη ιδιοτιμή εξαρτάται από το μέγεθος του κελιού και από το μήκος των αλυσίδων. Τονίζουμε ότι δεν περιμένουμε τα δεδομένα ΠΕ να είναι άμεσα συγκρίσιμα με τους τυχαίους περιπάτους ίδιου μήκους. Περιμένουμε ότι οι αλυσίδες ΠΕ είναι λιγότερο διαπλεγμένες από τους τυχαίους περιπάτους μήκους 1000.

Μία ειδική μορφή πίνακα περιέλιξης χρησιμοποιείται στον ορισμό του πολυώνυμου Alexander ενός κόμβου ή κρίκου, συμβολίζουμε V . Τότε η υπογραφή του πίνακα $V - V^T$ είναι μία αναλλοίωτη ισοτοπίας του αντίστοιχου κόμβου ή κρίκου.

Η Εικόνα 4.9 (b) δείχνει την υπογραφή του πίνακα $LM_C - LM_C^T$. Αυτό δεν αντιστοιχεί σε κάποια γνωστή αναλλοίωτη κόμβων και κρίκων. Παρατηρούμε ότι αυξάνει ανάλογα με το μέγεθος του κελιού. Εάν μπορούσαμε να συνδέσουμε τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης σε έναν κόμβο ή κρίκο που περιγράφεται από τις αλυσίδες που αποτελούν το τήγμα, τότε πράγματι θα περιμέναμε να εξαρτάται ανάλογα από το πλήθος των συνιστωσών. Οι αυξητικές τάσεις όλων μοιάζουν, με μία μικρή απόκλιση για τα συστήματα C και D που αντιστοιχούν στις πιο μακριές και πιο ανομοιογενή συστήματα αντίστοιχα. Η αντίστοιχη τιμή για τα δείγματα ΠΕ είναι 3.05.



Σχήμα 4.9: (a) Η μέση απόλυτη μέγιστη ιδιοτιμή 100 δειγμάτων ως προς το μέγεθος του κελιού. (b) Η μέση απόλυτη υπογραφή του πίνακα. Παρατηρούμε ότι η υπογραφή δεν παραμένει η ίδια για τα ίδια συστήματα, και δεν μπορεί να διακρίνει τα διαφορετικά συστήματα.



Σχήμα 4.10: α) Η μέση σφαιρικότητα των ιδιοτιμών του πίνακα ως προς το μέγεθος του κελιού και β) Η μέση τιμή του πλήθους των μη αρνητικών ιδιοτιμών του πίνακα.

Η ασφαιρικότητα των ιδιοτιμών ενός πίνακα μεγέθους d ορίζεται ως [129, 95]:

$$A_d = \frac{1}{d-1} \frac{\sum_{i>j}^d \langle (R_i^2 - R_j^2)^2 \rangle}{\langle (\sum_i R_i^2)^2 \rangle} \quad (4.141)$$

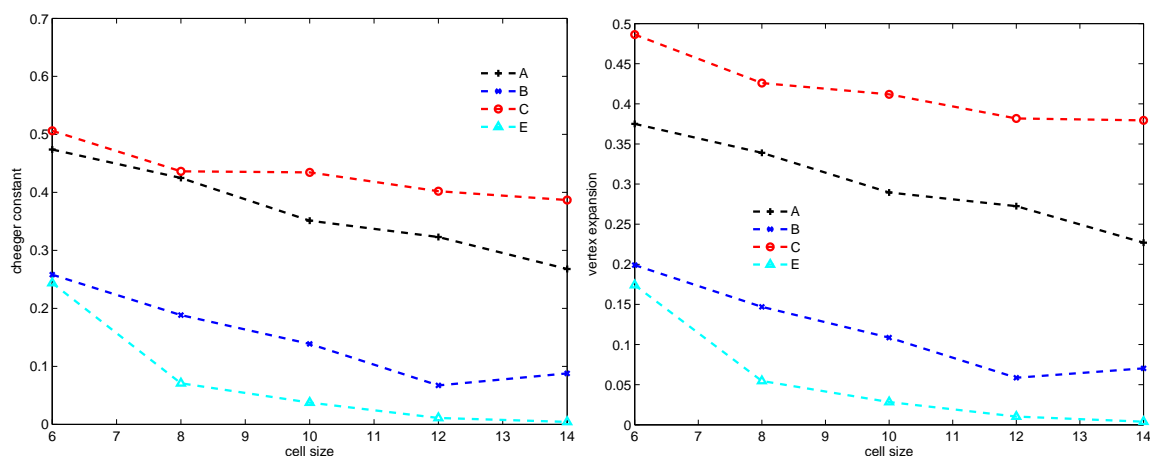
όπου R_i είναι η ιδιοτιμή του πίνακα και μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν ένα μέτρο της σχετικής απόκλισης των ιδιοτιμών του πίνακα.

Η Εικόνα 4.10(α) δείχνει την μέση ασφαιρικότητα ως προς το μέγεθος του κελιού. Παρατηρούμε ότι η αυξητική τάση είναι παρόμοια για όλα τα συστήματα και όλα τείνουν σε μία σταθερή τιμή. Επίσης, παρατηρούμε ότι η ασφαιρικότητα του συστήματος Δ , είναι μεγαλύτερη σε όλα τα μεγέθη κελιών. Αυτό υποδεικνύει ότι η ασφαιρικότητα μπορεί να διακρίνει μεταξύ των ομοιογενών και των ανομοιογενών συστημάτων με μικρή διαφορά. Η αντίστοιχη τιμή για τα δείγματα ΠΕ είναι 0.028539, που είναι μικρότερη από όλα τα υπόλοιπα συστήματα στο αντίστοιχο μέγεθος κελιού, υποδεικνύοντας μία μεγαλύτερη ομοιογένεια.

Η Εικόνα 4.10(β) δείχνει την μέση τιμή του πλήθους των μη αρνητικών ιδιοτιμών του πίνακα περιέλιξης ως προς το μέγεθος του κελιού. Αυτό είναι ένα άνω φράγμα του αριθμού ανεξαρτησίας ενός γραφήματος $\alpha(G)$. Παρατηρούμε ότι το $\alpha(G)$ αυξάνει ανάλογα με το μέγεθος του κελιού και όλα τα συστήματα έχουν μία παρόμοια αυξητική τάση με μία μικρή απόκλιση για το σύστημα B . Πράγματι, περιμένουμε ότι το $\alpha(G)$ θα αυξάνει γραμμικά με το μέγεθος του κελιού (δείτε Παρατήρηση 4.2.7). Όταν συγκρίνουμε τα αποτελέσματα σε μικρά μεγέθη κελιών, όπου οι αλυσίδες δεν μπορούν να ξεδιπλωθούν σε ένα κελί, τότε βλέπουμε ότι το σύστημα D που έχει δυο συνεκτικές συνιστώσες έχει διαφορετική στιμμή από τα άλλα, και ισούται με 2, όπως

αναμενόταν, αφού γνωρίζουμε ότι υπάρχουν δύο αλυσίδες που δεν είναι πεπλεγμένες μεταξύ τους. Η αντίστοιχη τιμή για τα δείγματα ΠΣ είναι 4.525. Αυτή η τιμή είναι πιο κοντά σε αυτή του συστήματος B .

Στη συνέχεια, υπολογίζουμε την σταθερά του Cheeger και την εξάπλωση κορυφών των συστημάτων. Τα αποτελέσματα φαίνονται στην Εικόνα 4.11. Το σύστημα D δεν φαίνεται στην εικόνα, αφού η τιμή του είναι παντού μηδέν. Αυτό αναμένεται, αφού αποτελείται από δύο μη συννεκτικές δομές. Στην Εικόνα 4.11 παρατηρούμε μία παρόμοια αυξητική τάση για όλα τα συστήματα, με μειωτική τάση, όπως αναμενεται από την Πρόταση 4.2.1. Επίσης, παρατηρούμε ότι είναι $0 = D < E < B < A < C$ για κάθε μέγεθος κελιού. Πράγματι, περιμένουμε το σύστημα E να έχει την μικρότερη τιμή αφού αφορά ένα σύστημα δύο στρωμάτων που αλληλοεπικαλύπτονται κατά 50%. Είναι ενδιαφέρον ότι παρατηρούμε μία διαφορά στα άλλα συστήματα. Αυτό υπονοεί ότι τα πιο πεπλεγμένα συστήματα είναι πιο συννεκτικά όπως αυτό μετράται από τις παραπάνω ποσότητες.



Σχήμα 4.11: α) Η μέση σταθερά του cheeger ως προς το μέγεθος του κελιού. Παρατηρούμε ότι η σταθερά του Cheeger ενός συστήματος D είναι μηδέν για όλα τα μεγέθη κελιών. β) Η μέση τιμή της εξάπλωσης κορυφών των γραφημάτων. Οι τιμές του συστήματος D είναι μηδέν για όλα τα μεγέθη κελιών.

Στην Εικόνα 4.12α) φαίνεται η μέση σικρότερη ιδιοτιμή του Λαπλασιανού πίνακα, ως προς το μέγεθος του κελιού. Παρατηρούμε ότι η τιμή είναι σχεδόν 0 για όλα τα μεγέθη κελιών. Πράγματι, αυτό επιβεβαιώνει το γεγονός ότι $\lambda_{min} = 0$ για τη Λαπλασιανή ενός γραφήματος. Στην Εικόνα 4.12β) φαίνεται η μέση δεύτερη ιδιοτιμή του Λαπλασιανού πίνακα. Παρατηρούμε ότι η $\langle \lambda_2 \rangle$ μικραίνει για όλα τα συστήματα ως προς το μέγεθος του κελιού. Με την ανισότητα

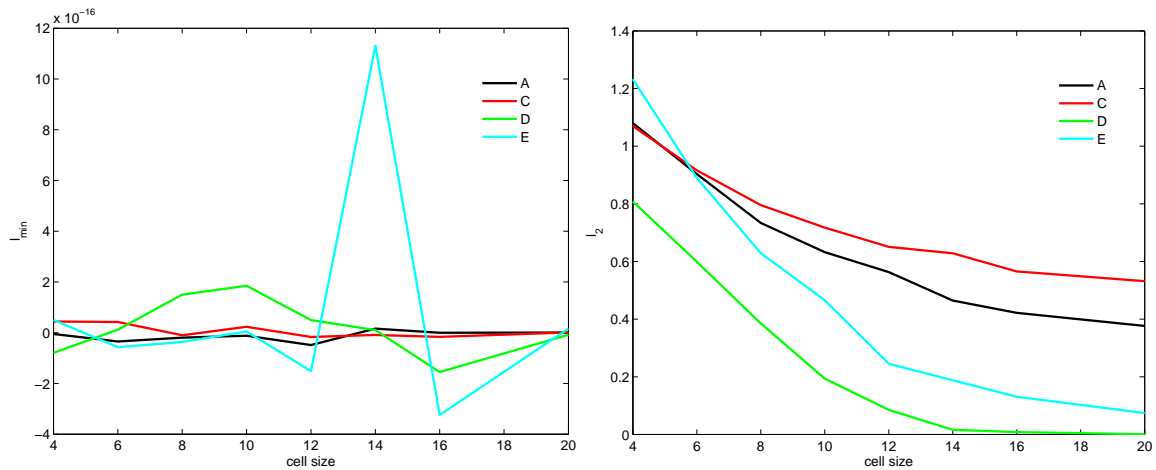
του Cheeger, έχουμε τα παρακάτω όρια για την λ_2 :

$$2h_G \geq \lambda_2 \geq \frac{h_G^2}{2} \quad (4.142)$$

Από την Πρόταση 4.2.1 είναι $h_{mG} = O(\frac{1}{m})$, άρα έχουμε:

$$O(\frac{2}{m}) \geq (\lambda_2)_m \geq O(\frac{1}{2m^2}) \quad (4.143)$$

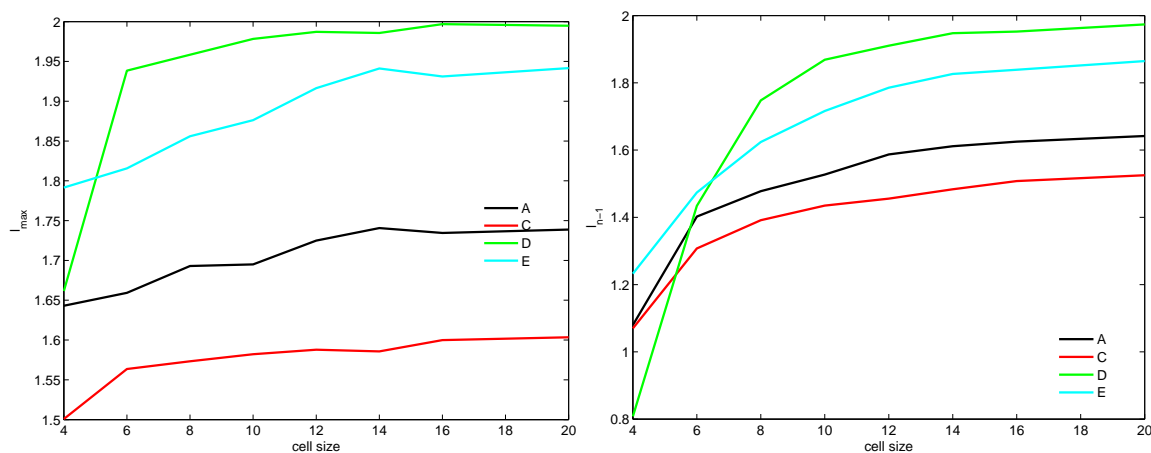
Άρα, περιμένουμε ότι η λ_2 θα μειώνεται επίσης, κάτι που επιβεβαιώνεται από τα αριθμητικά μας αποτελέσματα. Ξανά παρατηρούμε την διάταξη $D < E < A < C$. Για τα δείγματα ΠΕ, είναι $\lambda_2 = 0.98628$, που είναι μεγαλύτερο από τα υπόλοιπα, όπως αναμενόταν.



Σχήμα 4.12: α) Η μέση μικρότερη ιδιοτιμή, λ_{min} και β) η μέση δεύτερη μικρότερη ιδιοτιμή, $(\lambda_{min})_2$, της Λαπλασιανής του γραφήματος ως προς το μέγεθος του κελιού.

Η Εικόνα 4.13α) δείχνει την μέση μέγιστη ιδιοτιμή του Λαπλασιανού πίνακα, ως προς το μέγεθος του κελιού. Παρατηρούμε ότι για όλα τα συστήματα είναι $\langle \lambda_{max} \rangle > 1$, που από το Λήμμα 4.2.4, σημαίνει ότι δεν υπάρχουν απομονωμένες κορυφές στα γραφήματα, δηλαδή, κατά μέσο όρο, δεν υπάρχουν αλυσίδες που δεν είναι πεπλεγμένες με καμία άλλη αλυσίδα στο τήγμα. Πράγματι, αυτό δεν είναι κάτι που περιμένουμε να συμβαίνει στα δικά μας συστήματα. Παρατηρούμε ότι για το σύστημα τύπου D , είναι $\langle \lambda_{max} \rangle \approx 2$. Από το Λήμμα 4.2.4 αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μία συννεκτική συνιστώσα που είναι διμερής. Πράγματι, για αυτό το σύστημα υπάρχουν δύο συννεκτικές συνιστώσες, κάθε μία από τις οποίες αναπαριστά συστήματα που είναι διαπλεγμένα σε μία σωληνοειδή περιοχή. Καθώς το μέγεθος του κελιού αυξάνει, εμφανίζονται αλυσίδες στο ίδιο στρώμα που βρίσκονται μακριά η μία από την άλλη για αν είναι

πεπλεγμένες. Ξανά παρατηρούμε μία εξάρτηση στην συνεκτικότητα των συστημάτων και το μήκος τους. Παρατηρούμε την παρακάτω ταξινόμηση: $C < A < E < D$ που είναι η αντίστροφη από εκείνη για την σταθερά του Cheeger και την λ_2 . Για τα δείγματα ΠΕ είναι $\lambda_{max} = 1.0264$ και $\lambda_{n-1} = 1.0179$.



Σχήμα 4.13: α) Η μέση μεγαλύτερη ιδιοτιμή, λ_n και β) η μέση δεύτερη μεγαλύτερη ιδιοτιμή, $(\lambda_{n-1})_2$, της Λαπλασιανής του γραφήματος ως προς το μέγεθος του κελιού.

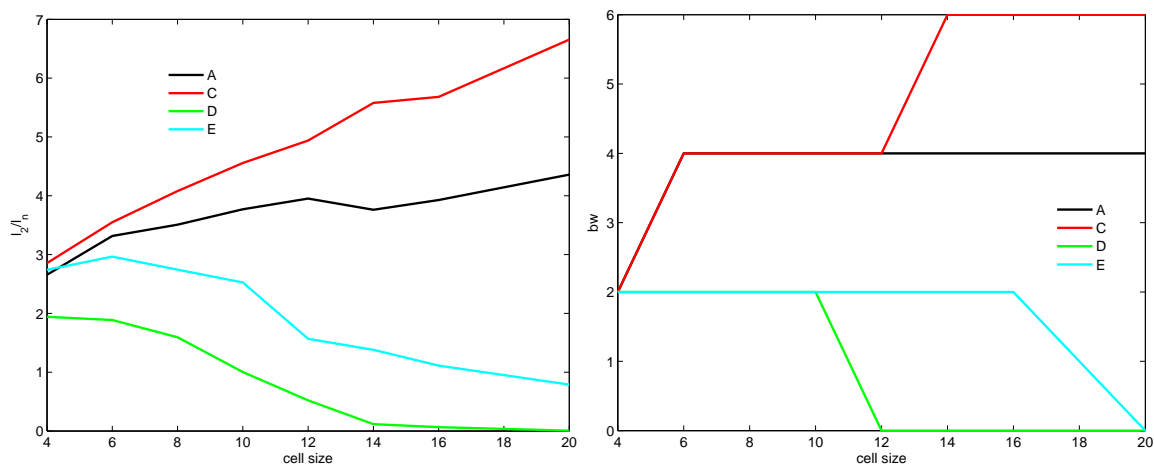
Η Εικόνα 4.14 δείχνει το πηλίκο της μέγιστης με την δεύτερη ιδιοτιμή, που παρέχει ένα φράγμα για το πλάτος του πίνακα. Για τα δείγματα ΠΕ είναι $b = 7.7138$. Παρατηρούμε ότι για τα συστήματα E και D αυξάνει με το μέγεθος του κελιού, αλλά αυξάνει για τα συστήματα A και B . Για τα συστήματα D και E περιμένουμε ένα μικρότερο πλάτος αφού έχουν χαμηλή συνεκτικότητα. Επίσης παρατηρείται εξάρτηση ως προς το μέγεθος του κελιού.

Τέλος οι Εικόνες 4.15,4.16,4.17 δείχνουν το ελάχιστο πλάτος των πινάκων για κάποια ενδεικτικά δείγματα κάθε συστήματος, που παρέχουν μία πιο ρεαλιστική και κατανοητή έκφραση της προηγούμενης ανάλυσης. Δοθέντος του πίνακα ενός γραφήματος, η ταξινόμηση ελαχίστου πλάτους δίνει μία ταξινόμηση των κορυφών του γραφήματος που ελαχιστοποιεί το πλάτος.

Η Εικόνα 4.15 δείχνει την κατανομή ελαχίστου πλάτους των συστημάτων τύπου D . από τους πίνακες που προκύπτουν είναι προφανές ότι τα συστήματα αποτελούνται από δύο μη συνεκτικά μέρη.

Η Εικόνα 4.16 δείχνει την ταξινόμηση ελαχίστου πλάτους για συστήματα τύπου E . Παρατηρούμε ότι ο πίνακας που προκύπτει είναι διαγώνιος μπλόκ πίνακας, που μπορεί να είναι μη συνδεδεμένος. Αυτό δείχνει την ασθενή συνεκτικότητα του συστήματος. Η Εικόνα 4.17 δείχνει την ταξινόμηση ελαχίστου πλάτους για συστήματα τύπου A . Το πλάτος των πινάκων είναι

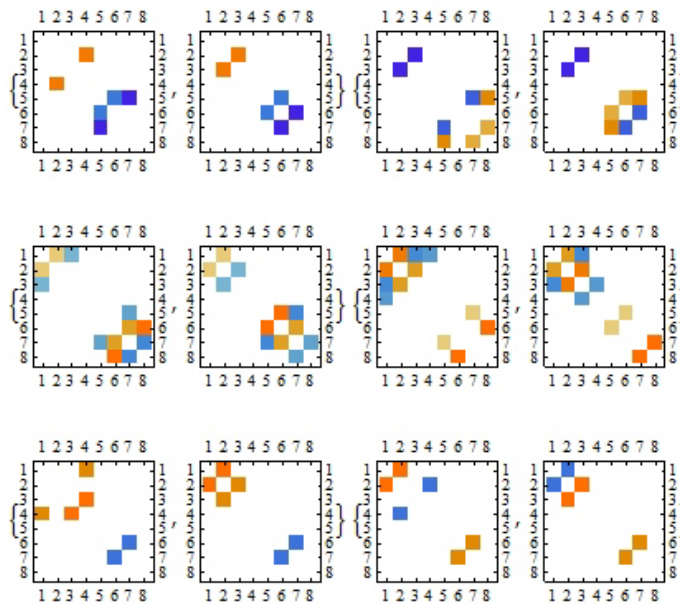
μεγαλύτερο σε αυτή την περίπτωση και δεν παρατηρούμε μη συνεκτικά μπλόκ. Η Εικόνα 4.18 δείχνει την ταξινόμηση ελάχιστου πλάτους για τα συστήματα τύπου C . Η κατάσταση είναι παρόμοια με αυτή του συστήματος A . Το πλάτος σε αυτή την περίπτωση είναι ακόμα μεγαλύτερο, δείχνοντας μεγαλύτερη συνεκτικότητα.



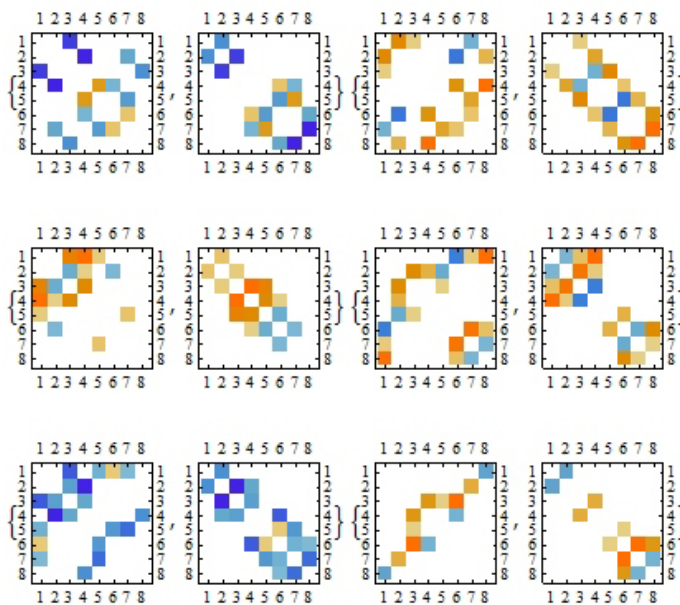
Σχήμα 4.14: α) Το μέσο πηλίκιο λ_2/λ_n και β) το μέσο κατώτερο όριο του πλάτους όπως δίνεται από την Εξ. 4.138.

Η Εικόνα 4.19 δείχνει τη διάταξη ελάχιστου πλάτους για τα συστήματα τύπου B . Η κατάσταση εδώ είναι παρόμοια με αυτή των συστημάτων C και D . Το πλάτος είναι μικρό και υπάρχουν μή συνεκτικά μπλόκ.

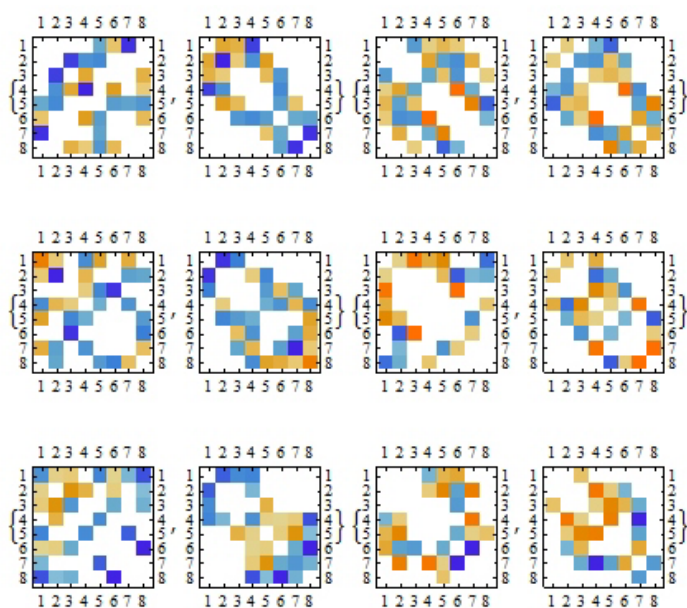
Η Εικόνα 4.20 δείχνει την ταξινόμηση ελάχιστου πλάτους για τα δείγματα ΠΕ. Παρατηρούμε ότι το πλάτος είναι ακόμα μεγαλύτερο απ'ότι το σύστημα C .



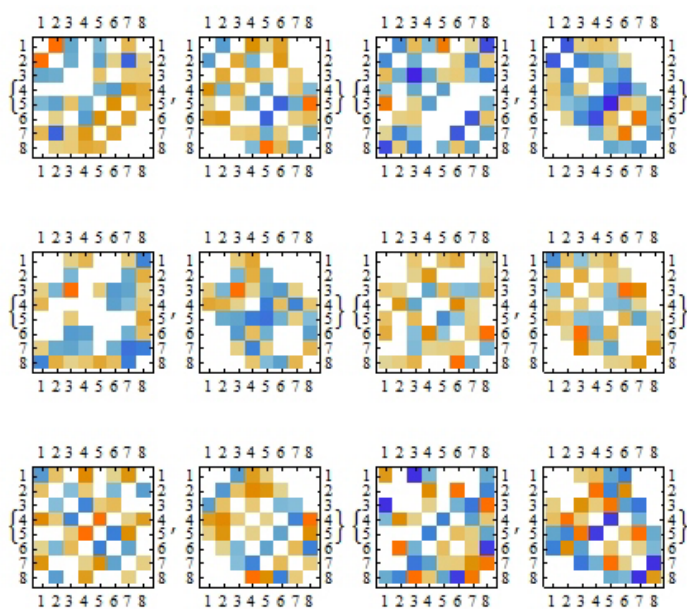
Σχήμα 4.15: Το ελάχιστο πλάτος των δειγμάτων του συστήματος D



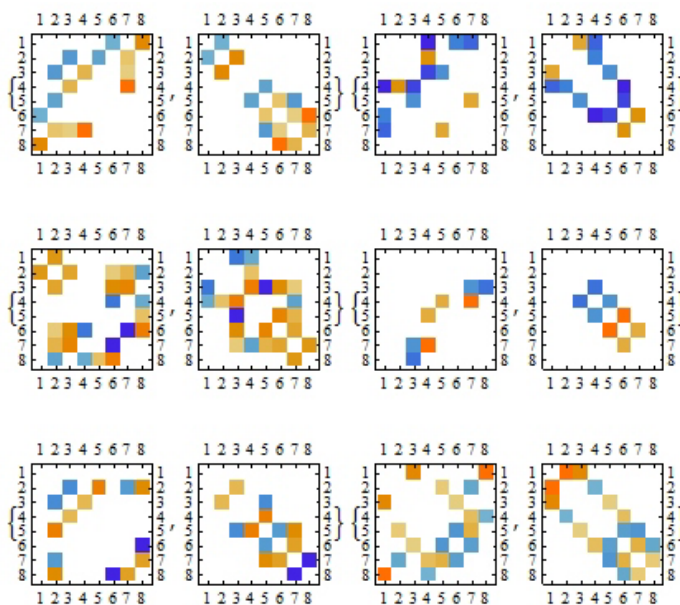
Σχήμα 4.16: Το ελάχιστο πλάτος των δειγμάτων του συστήματος E.



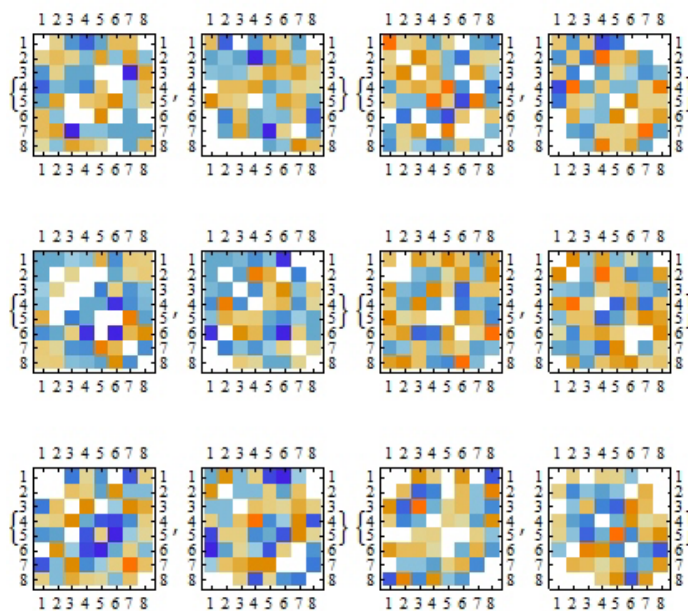
Σχήμα 4.17: Το ελάχιστο πλάτος για συστήματα τύπου A.



Σχήμα 4.18: Το ελάχιστο πλάτος για συστήματα τύπου C.



Σχήμα 4.19: Το ελάχιστο πλάτος για αυατήματα τύπου Β.



Σχήμα 4.20: Το ελάχιστο πλάτος για δείγματα ΠΕ.

4.4 Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό ορίσαμε ένα μέτρο διαπλοκής για μία συλλογής αλυσίδων, τον πίνακα περιέλιξης. Χρησιμοποιήσαμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης και τον περιοδικό αριθμό αυτοπεριέλιξης, για να μετρήσουμε την διαπλοκή μίας συλλογής αλυσίδων σε ΠΣΣ. Για να λάβουμε πληροφορία που μένει αναλλοίωτη από το μέγεθος του καλιού προσομοίωσης εξετάσαμε την εξάρτηση του περιοδικού πίνακα περιέλιξης από το μέγεθος του κελιού. Στα Λήμματα 4.1.7 και 4.1.28 αποδείξαμε ότι το συνολικό άθροισμα των στοιχείων μίας σειράς του περιοδικού πίνακα περιέλιξης είναι ανεξάρτητο του μεγέθους του κελιού. Επίσης, στις Προτάσεις 4.1.17 και 4.1.30 αποδείξαμε ότι κάποιες από τις ιδιοτιμές του περιοδικού πίνακα περιέλιξης δεν εξαρτώνται από το μέγεθος του κελιού. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα σε συστήματα τυχαίων περιπάτων επιβεβαίωσαν το αποτέλεσμά μας ότι το συνολικό άθροισμα των στοιχείων του περιοδικού πίνακα περιέλιξης αυξάνει γραμμικά με το μέγεθος του κελιού. Επίσης, έδειξαν ότι η μέγιστη ιδιοτιμή και η ασφαιρικότητα των ιδιοτιμών εξαρτώνται από το μέγεθος του κελιού. Ωστόσο, υπάρχει ένα μέγεθος κελιού μετά το οποίο αυτά τα μεγέθη τείνουν σε μία ασυμπτωτική τιμή, η οποία διαφέρει για κάθε σύστημα ανάλογα με το μήκος των αλυσίδων ή την ομοιογένεια της διαπλοκής αντίστοιχα.

Στη συνέχεια δείξαμε ότι μπορούμε να λάβουμε περισσότερη πληροφορία για την διαπλοκή του συστήματος χρησιμοποιώντας εργαλεία από την θεωρία γραφημάτων. Δείξαμε ότι μπορούμε να αντιστοιχίσουμε κάθε κελί σε ένα γράφημα με βάρη και να χρησιμοποιήσουμε τον πίνακα περιέλιξης και την λαπλασιανή του γραφήματος για να μετρήσουμε τον βαθμό συννεκτικότητας του γραφήματος που συνδεεται με την ομοιογένεια της διαπλοκής του τμήματος. Στις Προτάσεις 4.2.1 και 4.2.2 αποδείξαμε ότι η σταθερά του Cheeger του αντίστοιχου γραφήματος εξαρτάται από το μέγεθος του κελιού. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα σε διαφορετικά συστήματα τυχαίων περιπάτων επιβεβαίωσαν τα αναλυτικά αποτελέσματα και έδειξαν ότι όλα τα μέτρα συννεκτικότητας δίνουν μία παρόμοια διάταξη για τα διαφορετικά συστήματα, ανάλογα με τον χωρικό τους περιορισμό των αλυσίδων, και το μήκος τους. Τα αποτελέσματά μας σε δείγματα ΠΕ συμβαδίζουν με αυτά των τυχαίων περιπάτων.

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα

Είναι γνωστό ότι οι πολυμερικές αλυσίδες δεν μπορούν να διαπεράσουν η μία την άλλη και αυτό επηρεάζει την κίνησή τους και δημιουργούνται "διαπλοκές" οι οποίες επηρεάζουν τις ιδιότητες ιξώδους ενός τήγματος. Οι πολυμερικές αλυσίδες μπορεί να είναι κλειστές ή ανοικτές. Η διαπλοκή των κλειστών αλυσίδων μπορεί να μελετηθεί με εργαλεία της Θεωρίας Κόμβων, ενώ στην περίπτωση ανοικτών αλυσίδων η διαπλοκή δεν έχει μελετηθεί με σαφή μαθηματικά εργαλεία. Σε αυτή την διατριβή δείξαμε ότι το ολοκλήρωμα περιέλιξης κατά Gauss, L , μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν ένα μέτρο διαπλοκής για κλειστές και ανοικτές αλυσίδες. Στην περίπτωση κλειστών αλυσίδων είναι μία (ασθενής) ακέραια τοπολογική αναλλοίωτη. Πιο συγκεκριμένα, είναι αναλλοίωτη υπό ομοτοπία κρίκων. Στην περίπτωση ανοικτών αλυσίδων δείξαμε ότι αυτό είναι ένα μέτρο που εξαρτάται από την γεωμετρία των αλυσίδων, και μετρά την περιστροφή της μίας αλυσίδας γύρω από την άλλη. Δείξαμε ότι είναι μία συνεχής συνάρτηση των συντεταγμένων των αλυσίδων. Χρησιμοποιήσαμε τον αριθμό περιέλιξης κατά Gauss για να μελετήσουμε την διαπλοκή ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων σε περιορισμένο χώρο. Αυτό είναι ένα πολύ απολό μοντέλο πολυμερών σε περιορισμένο χώρο. Απόδειξαμε ότι είναι $\langle L^2 \rangle \sim O(n^2)$ και $\langle Wr^2 \rangle \sim O(n^2)$ για αλυσίδες μήκους n , και τα αριθμητικά μας αποτελέσματα το επιβεβαίωσαν. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα στον μέσο απόλυτο αριθμό περιέλιξης ομοιόμορφων τυχαίων περιπάτων και τυχαίων περιπάτων ίσου μήκους έδειξαν μία αυξητική τάση της μορφής $\langle |L| \rangle \sim O(n)$ και $\langle |L| \rangle \approx O(\sqrt{n})$ αντίστοιχα. Άρα ο αριθμός περιέλιξης κατά Gauss διακρίνει την διαπλοκή διαφορετικών μοντέλων αλυσίδων. Θα ήταν ενδιαφέρον να μελετήσουμε αναλυτικά την αυξητική τάση του L για τυχαίους περιπάτους ίσου μήκους και να μελετήσουμε πιο ρεαλιστικά μοντέλα πολυμερικών αλυσίδων. Για τήγματα πολυμερών, υπάρχει ένα κρίσιμο μοριακό βάρος που σχετίζεται με την διαπλοκή και στο οποίο οι ιδιότητες ιξώδους των πολυμερών δείχνουν μία αλλαγή [115, 133]. Θα ήταν ενδιαφέρον να εφαρμόσουμε τον ολοκλήρωμα κατά Gauss σε πολυμερικές αλυσίδες διαφορετικού μήκους για να εντοπίσουμε αυτό το μήκος.

Η προσομοίωση πολυμερικών τηγμάτων είναι πολύ σημαντικός παράγοντας στην μελέτη τους. Είναι πολύ δύσκολο να προσομοιώσουμε τοπολογικά ισορροπημένα δείγματα. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω των κινήσεων αλλαγής συνεκτικότητας Monte Carlo (MC) [127]. Αυτοί οι αλγόριθμοι έχουν αυξήσει την δυνατότητα προσομοίωσης ιδιοτήτων μεγάλης κλίμακας των αλυσίδων στα πολυμερή. Για την προσομοίωση πολυμερικών τηγμάτων όμως χρησιμοποιούνται και Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες (ΠΣΣ). Ένας από τους λόγους για τους οποίους οι κόμβοι στα πολυμερή δεν έχουν μελετηθεί εκτενώς σε πυκνά τήγματα πολυμερών είναι η χρήση των περιοδικών συνθηκών. Πρόσφατα κάποιες μελέτες του πολυωνύμου Jones έγιναν προς αυτή την κατεύθυνση [108, 94], αλλά μπορούσαν να εφαρμοστούν μόνο σε κλειστές αλυσίδες και ήταν περιορισμένη μόνο σε συστήματα με μία και δύο ΠΣΣ. Σε αυτή την μελέτη ορίσαμε τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης, LK_P σαν ένα μέτρο διαπλοκής κλειστών ή ανοικτών αλυσίδων σε συστήματα με μία, δύο ή τρεις ΠΣΣ. Για κλειστές αλυσίδες σε ΠΣΣ αυτό είναι μία ακέραια τοπολογική αναλλοίωτη. Για ανοικτές αλυσίδες αυτό είναι ένα άπειρο άθροισμα το οποίο αποδείξαμε ότι συγκλίνει. Επίσης, για ανοικτές αλυσίδες είναι μία συνεχής συνάρτηση των συντεταγμένων των αλυσίδων. Για την εφαρμογή σε γραμμικά πολυμερή ορίσαμε δύο προσεγγίσεις του περιοδικού αριθμού περιέλιξης, τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης, LK , και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης κελιού, LK_C . Μελετήσαμε τα δύο μέτρα και τα συγκρίναμε αριθμητικά. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα έδειξαν ότι κατά μέσο όρο μπορούν να δώσουν μία καλή προσέγγιση, με τον LK_C να δίνει μία καλύτερη προσέγγιση, αλλά με μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος. Ομοίως, ορίσαμε μέτρα αυτοδιαπλοκής σε ΠΣΣ, τον περιοδικό αριθμό αυτο-περιέλιξης, την περιοδική συστροφή και τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης αυτο-εικόνων.

Τα εμπόδια που συναντά μία αλυσίδα περιορίζουν την κίνησή της σε μία σωληνοειδή περιοχή. Το μοντέλο σωλήνα ήταν πολύ επιτυχημένο στο να περιγράφει προβλήματα της ρεολογίας των πολυμερών. Αλγόριθμοι αδροποίησης, όπως ο CReTA, ο Z ή ο PPA μπορούν να φτιάξουν τα πρωταρχικά μονοπάτια σε ένα τήγμα. Από το πρωταρχικό μονοπάτι κανείς μπορεί να λάβει τοπολογική πληροφορία σχετικά με την διάμετρο του σωλήνα που είναι θεμελιώδης παράμετρος. Εφαρμόσαμε τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης σε αλυσίδες τήγατος ΠΕ πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA για να ελέγξουμε την επηρροή του αλγορίθμου στην διαπλοκή των αλυσίδων. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα έδειξαν ότι ο LK είναι σχεδόν ο ίδιος πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου CReTA, άρα ο αλγόριθμος διατηρεί την τοπολογική πληροφορία. Σε μελλοντικές εργασίες θα είχε ενδιαφέρον να συνδυάσουμε τον αλγόριθμο CReTA και τον τοπικό περιοδικό αριθμό περιέλιξης και αυτο-περιέλιξης για να λάβουμε περισσότερη πληροφορία. Για παράδειγμα, θα είχε ενδιαφέρον να χρησιμοποιήσουμε τον LK για να μελετήσουμε τις διακυμάνσεις του κατά μία προσομοίωση ΜΔ, για να βρούμε τον χρόνο διαπλοκής τ_e , που είναι ο χρόνος που χρειάζεται μία αλυσίδα για να διερευνήσει τον γύρω σωλήνα [115, 16]. Μία άλλη ενδιαφέρουσα μελέτη θα ήταν να εφαρμόσουμε τον LK σε

πολυμερικές αλυσίδες σε ένα τήγμα κατά την διάρκεια ενός πειράματος όπου εφαρμόζουμε μία δύναμη τάσης στις αλυσίδες.

Τα μέτρα διαπλοκής που περιγράφηκαν μέχρι στιγμής αφορούν μία αλυσίδα ή ένα ζεύγος αλυσίδων (ή ένα ζεύγος συλλογών αλυσίδων). Όπως αναφέραμε προηγουμένως, η διαπλοκή στα τήγματα πολυμερών είναι ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων, και ο στόχος μας είναι να το περιγράψουμε με ένα μέτρο διαπλοκής που λαμβάνει υπόψην όλη την διαμόρφωση ενός τήγματος. Για αυτό τον σκοπό ορίσαμε τον πίνακα περιέλιξης. Για συστήματα με ΠΣΣ ορίσαμε τον περιοδικό πίνακα περιέλιξης χρησιμοποιώντας τον περιοδικό αριθμό περιέλιξης. Για την προσομοίωση ενός πολυμερικού συστήματος το μέγεθος του κελιού μπορεί να έχει διάφορες τιμές και είναι χρήσιμο να γνωρίζουμε πώς σχετίζονται τα τήγματα από διαφορετικά μεγέθη κελιού. Αποδείξαμε ότι το άθροισμα των στοιχείων κάθε σειράς του πίνακα περιέλιξης είναι ανεξάρτητα του μεγέθους του κελιού. Επίσης, αποδείξαμε ότι μερικές από τις ιδιοτιμές του περιοδικού πίνακα περιέλιξης είναι επίσης ανεξάρτητες από το μέγεθος του κελιού. Άρα ο περιοδικός πίνακας περιέλιξης λαμβάνει πληροφορία που είναι ανεξάρτητη από το μέγεθος του κελιού και που θα μπορούσε να χαρακτηρίσει το τήγμα. Υπολογίσαμε τους περιοδικούς πίνακες περιέλιξης διαφορετικών συστημάτων τυχαίων περιπάτων. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα επιβεβαίωσαν τις αναλυτικές μας προβλέψεις. Για να εξετάσουμε την ομοιογένεια της διαπλοκής στα τήγματα πολυμερούς, προτείναμε να σχετίσουμε ένα τήγμα με ένα γράφημα με βάρη. Η σταθερά του Cheeger είναι ένα μέγεθος που μπορεί να διακρίνει ανάμεσα στα ανομοιογενή τήγματα. Μία ενδιαφέρουσα μελέτη θα ήταν να χρησιμοποιήσουμε τον πίνακα περιέλιξης ώστε να εντοπίσουμε αλυσίδες των οποίων η αφαίρεση από μία διαμόρφωση θα άλλαζε την διαπλοκή του. Αυτό είναι κάτι που συναντάται στις κοτσίδες Brunnian.

Βιβλιογραφία

- [1] Agarwal P. K., Edelsbrunner H. and Wang Y. 2004 Computing the writhing number of a polygonal knot *Discrete Comput. Geom.* **32** 37-53.
- [2] Alexander J. W., (1923) A Lemma on Systems of Knotted Curves, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*,**9**,93-95.
- [3] Arsuaga J., Vazquez M., Trigueros S., Sumners D. W. and Roca J. 2002 Knotting probability of DNA molecules confined in restricted volumes: DNA knotting in phage capsids *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)* Vol 99 pp. 5373-77.
- [4] Arsuaga J, Blackstone T, Diao Y, Karadayi E and Saito M 2007 The linking of uniform random polygons in confined spaces *J. Phys. A:Math. Theor.* **40** 1925-36.
- [5] Arsuaga J., Blackstone T., Diao Y., Hinson K., Karadayi E. and Saito M. 2007 Sampling large random knots in a confined space *J. Phys. A:Math. Theor.* **40** 11697-11711.
- [6] Arsuaga J., Diao Y. and Vazquez M. 2008 Mathematical methods in DNA topology : Applications to chromosome organization and site-specific recombination *Preprint* 2008-11.
- [7] Arsuaga J., Borgo B., Diao Y. and Sharein R. 2009 The growth of the mean average crossing number of equilateral polygons in confinement *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 465202-11.
- [8] Arteca G. A. 1997 Self-similarity in entanglement complexity along the backbones of compact proteins *Phys Rev. E* **56** no.4 4516-4520.
- [9] Arteca G. and O. Tapia 2000 Relative measure of geometrical entanglement to study folding-unfolding transitions *Int. J Quantum Chem* **80** no.4-5 848-855.
- [10] Banchoff T. 1976 Self linking numbers of space polygons *Indiana Univ. Math. J.* **25** No. 12 1171-88.

- [11] Barbi M., Mozziconacci J. and Victor J. 2005 How does the chromatin fiber deal with topological constraints, *Phys. Rev. E* **71** 031910.
- [12] Bastide J., Boué F., Mendes E., Zielinski F., Buzier M., Lartigue C., Oeser R. and Linder P. 1993 Is the distribution of entanglements homogeneous in polymer melts? *Progr. Coll. Pol. Sc.* **91** 105-108.
- [13] Bateman P. 1951 On the representations of a number as a sum of three squares *Trans. Amer. Math. Soc.* **71** 70-101.
- [14] Bauer W. R., Crick F. H. C. and White J. H. 1980 Supercoiled DNA *Sci. American* **243** 118.
- [15] Berger M. A. and Prior C. 2006 The writhe of open and closed curves *J Phys A: Math. Gen.* **39** 8321-48.
- [16] Bisbee W., Qin J. and Milner S. 2011 Finding the tube with isoconfigurational averaging *Macromolecules* **44** (22) pp 8972-8980.
- [17] Brouwer A. E. and Haemers W. H. Spectra of Graphs 2012 Springer XIII.
- [18] Buck G., Scharein R. G., Schnick J. and Simon J. (2008) Accessibility and occlusion of biopolymers, ray tracing of radiating tubes and the temperature of a tangle *Phys Rev E* **77** 011803-6.
- [19] Burde G. and Zieschang H. *Knots* Walter de Gruyter Berlin New York 2003.
- [20] Calugreanu G. 1961 Sur les classes d'isotopie des noeuds tridimensionnels et leurs invariants *Czechoslovak Mathematical Journal* **11** 588-625.
- [21] Calvo J. A. 1999 Geometric knot spaces and polygonal isotopy *Preprint* ArXiv:math/9904037v2.
- [22] Chamizo F., Christobal E. and Ubis A. (2007) Visible lattice points in the sphere *J. of Number Theory*, **126** 200-211.
- [23] Chamizo F., Christobal E. and Ubis A. 2007 Visible lattice points in the sphere *J. Number Theory* **126** 200-211.
- [24] Chung F. and Pden K. 2000 Weighted graph Laplacians and isoperimetric inequalities *Pac. J. Math.* **192** 257-273.

- [25] Cohen E. and Megiddo N. 1991 Recognizing properties of periodic graphs *DIMACS Series Disc. Math.* **4**.
- [26] Crick F. H. 1976 Linking numbers and nucleosomes *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **73** 2639-2643.
- [27] de Gennes P. G. 1979 *Scaling Concepts in Polymer Physics* (Cornell University Press Ithaca N Y).
- [28] Diao Y., Pippenger N. and Sumners D. W. 1993 On random knots *J. Knot Theory Ramif.* **3** 419-29.
- [29] Diao Y. 1995 The knotting of equilateral polygons in \mathbb{R}^3 *J. Knot Theory Ramif.* **4** 189-96.
- [30] Diao Y., Dobay A., Kushner R. B., Millett K. and Stasiak A. 2003 The average crossing number of equilateral random polygons *J. Phys. A: Math. Gen.* **36** 11561-74.
- [31] Diao Y., Dobay A. and Stasiak A. 2005 The average inter-crossing number of equilateral random walks and polygons *J. Phys. A: Math. Gen.* **38** 7601-16.
- [32] Dobay A., Dubochet J., Millett K., Sottas P. and Stasiak A. 2003 Scaling behavior of random knots *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **100** 5611-15.
- [33] Doi M. and Edwards S. F., *The Theory of Polymer Dynamics* (Clarendon Press, Oxford, 1986).
- [34] Edvinsson T, Elvingson C. and Arteca G. 2000 Variations in molecular compactness and chain entanglement during the compression of grafted polymers *Macromolecular Theory and Simulations* **9** no. 7 398-406.
- [35] Edwards F. 1967 Statistical mechanics with topological constraints: I *Proc Phys Soc* **91** 513-9.
- [36] Edwards F. 1968 Statistical mechanics with topological constraints: II *J Phys A: Gen Phys* **1** 15-28.
- [37] Erdos P. 1962 On the integers relatively prime to n and on a number-theoretic function considered by Jacobsthal *Math. Scand.* **10** 163-170.
- [38] Estermann T. 1959 On the representations of a number as a sum of three squares *Proc. Lond. Math. Soc.* (3) **9** 575-594.

- [39] Ewing B. and Millett K. 1997 Computational algorithms and the complexity of link polynomials *In Progress in Knot Theory and Related Topics* (Herman: Paris) pp 51-68.
- [40] Everaers R., Sukumaran S. K., Grest G. S., Svaneborg C., Sivasubramanian A., Kremer K., 2004, *Science*, **303**, 823.
- [41] Finch S. *Quadratic Dirichlet L-Series.*, unpublished note (2005); available online at <http://pauillac.inria.fr/algo/bsolve/>.
- [42] Foteinopoulou K., Karayiannis N. Ch., Laso M., Kröger M. and Mansfield M. L., 2008, *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 25702.
- [43] Freedman M. H., He Z-X and Wang Z 1994 Mobius energy of knots and unknots *Annals of Mathematics, Second Series* **134** No. 1 189-229.
- [44] Freyd P., Yetter D., Hoste J., Lickorish W., Millett K. and Ocneanu A. 1985 A new polynomial invariant for knots and links *Bull. Am. Math. Soc.* **12** 239-46.
- [45] Fuller B. 1978 Decomposition of the linking number of a closed ribbon: A problem from Molecular biology *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **75** 3557-3561.
- [46] Gauss K. F. 1877 *Zur mathematischen Theorie der electrodynamischen Wirkungen* Werke Königlischen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen vol 5 p 605.
- [47] Grassberger P. 2001 Opacity and entanglement of polymer chains *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 99959-63.
- [48] Grosswald E. *Representations of integers as sums of squares* Springer-Verlag 1985.
- [49] Grosberg Y. 2008 Total curvatures and total torsion of a freely jointed circular polymer with $n \gg 1$ segments *Macromolecules* **41**(12) 4524-27.
- [50] Hanse van Rensburg E. J., Sumners D. W., Wasserman E. and Whittington S. G., 1992, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **25**, 6557.
- [51] Haring-Oldenburg R., Lambropoulou S., Knot theory in handlebodies, *J. Knot Theory Ramifications* **11** (2002), no. 6, 921-943.
- [52] Hass J. and Lagarias J. C. 2001 The number of Reidemeister moves needed for unknotting *J. Amer. Math. Soc.* **14** 399-428.
- [53] Hensley D. 1994 The number of lattice points within a contour and visible from the origin *Pac. J. Math.* **166** No. 2 295-304.

- [54] Hirayama N., Tsurusaki K. and Deguchi T., 2009, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **42**, 105001.
- [55] Hirshfeld A. C 1997 Knots and Physics: Old wine in new bottles *Am J Phys* **66** No 12 1060-6.
- [56] Hoidn P., Kusner R. B. and Stasiak A. 2002 Quantization of energy and writhe in self-repelling knots *New J. Phys* **4** 20.1-11.
- [57] Holmes V. and Cozzarelli N. R. 2000 Closing the ring: Links between SMC proteins and chromosome partitioning, condensation and supercoiling *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **97** 1322-4.
- [58] Hughes, C. P. and Rudnick, Z. (2004) On the distribution of lattice points in thin annuli, *Int. Math. Res. Not.* **637**•658.
- [59] Iwata K. and Edwards S. F. 1989 New model of polymer entanglement: Localized Gauss integral model *J Chem Phys* **90** (8) 084567-15.
- [60] Ilg P. and Kröger M. 2010 Molecularly derived constitutive equation for low-molecular polymer melts from thermodynamically guided simulation *J. Rheol.* **55** 69-93.
- [61] Jacobi C. G. J. *Fundamenta Nova Theoriae Functionum Ellipticarum.* 1829.
- [62] Janse van Rensburg E. J., Orlandini E., Sumners D. W., Tesi M. C. and Whittington S. G. 1993 The writhe of a self-avoiding polygon *J Phys A: Math Gen* **26** L981-6.
- [63] Jones V.F.R., A polynomial invariant of knots via von Neumann algebras, *Bulletin of the AMS* **12** (1985), n?. 1.
- [64] Jones V.F.R., Hecke algebra representations of braid groups and link polynomials, *Annals of Mathematics* **126** (1987), 335-388.
- [65] Jordan C. (1909) *Cours d'Analyse de l'Ecole Polytechnique*, Gautier-Villiers.
- [66] Katritch V, Bednar J, Michoud D, Scharein R G, Dubochet J and Stasiak A 1996 Geometry and Physics of knots *Nature* **384** 142-5.
- [67] Kauffmann L H 2001 *Knots and Physics* (Ser Knots Everything World Sci vol.1).
- [68] Klenin K and Langowski J 2000 Computation of writhe in modelling of supercoiled DNA *Biopolymers* **54** 307-17.
- [69] Kotelyanskii M. J. and Theodorou D. N., *Simulation Methods for Polymers*, (Marcel Dekker, New York, 2004).

- [70] Kröger M 2005 Shortest multiple disconnected path for the analysis of entanglements in two and three- dimensional polymeric systems *Comp. Phys. Commun.* **168** 209.
- [71] Kröger M 2004 Simple models for complex nonequilibrium fluids *Phys. Rep.* **390** 453-551.
- [72] Kung W and Kamien R D 2003 Topological constraints at the Theta-point: Closed loops at two loops *Europhys Lett* **64** 3 323-29.
- [73] Lacher R C and Sumners D W 1991 *Data structures and algorithms for the computation of topological invariants of entanglements: link, twist and writhe Computer simulations of Polymers* R J Roe (New York: Press Prentic-Hall) 365.
- [74] Laing C and Sumners D W 2006 Computing the writhe on lattices *J Phys A: Math Gen* **39** 3535-43.
- [75] Laing C and Sumners D W 2007 The writhe of oriented polygonal graphs *J Knot Theor and its Ramif.* **12** 41.
- [76] Lambropoulou S., Knot theory related to generalized and cyclotomic Hecke algebras of type B, *J. Knot Theory Ramifications* 8 (1999), no. 5, 621-658.
- [77] Lambropoulou S., Braid structures in knot complements, handlebodies and 3-manifolds, *Knots in Hellas '98*, Ser. Knots Everything 24, pp. 274-289, World Sci. Press, 2000.
- [78] Lambropoulou S., Rourke C.P., Markov's theorem in 3-manifolds, *Topology and its Applications* 78 (1997), 95-122.
- [79] Lambropoulou S., Rourke C.P., Algebraic Markov equivalence for links in 3-manifolds, *Compositio Mathematica*, 142 (2006), 1039–1062.
- [80] Landau E., *Handbuch der Lehre von der Verteilung der Primzahlen*, Leipzig, Teubner, 1909.
- [81] Laso M., Karayiannis N. C., Foteinopoulou K., Mansfield M. L. and Kröger M., 2009, *Soft Matter*, **5**, 1762.
- [82] Liu Z. and Chan H. S. 2008 Efficient chain moves for Monte Carlo simulations of a wormlike DNA model *J. Chem Phys.* **128** 145104-31.
- [83] LeVeque W. J. *Fundamentals of number theory* Addison-Wesley 1977.

- [84] Louboutin S. *L-Functions and class numbers of imaginary quadratic fields and of quadratic extensions of an imaginary quadratic field.*
- [85] Mansfield M. L. 1994 Knots in Hamilton cycles *Macromolecules* **27** 5924-6.
- [86] Martinez-Robles M. L., Witz G., Hernandez P., Schwartzman J. B., Stasiak A. and Krimer D. B. 2009 Interplay of DNA supercoiling and catenation during the segregation of sister duplexes *Nucl. Acids Res.* **37** No 15 5126-37.
- [87] Mavrantzas V. and Theodorou D. N. 1998 Atomistic simulation of polymer melt elasticity: Calculation of the free energy of an oriented polymer melt *Macromolecules* **31** 6310-32.
- [88] McMillen T. and Goriely A. 2002 Tendril Perversion in intrinsically curved rods *J. Nonlinear Sci.* **12** 241-81.
- [89] Micheletti C., Marenduzzo D., Orlandini E. and Sumners D. W. 2006 Knotting of random ring polymers in confined spaces *J. Chem. Phys.* **124** 64903.1-10.
- [90] Millett K. , Dobay A. and Stasiak A., 2004, *Macromolecules*, **38**, 601.
K. Millett and B. Sheldon, 2005, *Ser. Knots and Everything*, **36**, 203.
- [91] Millett K. 2000 *Knots in Hellas'98 Delphi* (Ser Knots Everything World Sci vol.24) pp.306-34.
- [92] Millett K., Dobay A. and Stasiak A. 2004 Linear random knots and their scaling behavior *Macromolecules* **38** 601-606.
- [93] Millett K. and Sheldon B. 2005 *Tying down open knots: a statistical method for identifying open knots with applications to proteins, Physical and numerical models in knot theory*, Ser. Knots and Everything vol.36 (Singapore: World Scientific Pub) pp.203-217.
- [94] Morton H. R. and Grishanov S. 2009 Doubly Periodic Textile Structures *J. Knot. Theory Ramif.* **18** 12, 1597-1622.
- [95] Rawdon E. J., Kern J. C., Piatek M., Plunkett P., Stasiak A. and Millett K. C. 2008 Effect of knotting on the shape of polymers *Macromolecules* **41** 8281-87.
- [96] Milner S. T. and McLeish T. C. B. 1998 Reptation and Contour-Length Fluctuations in Melts of Linear Polymers *Phys. Rev. Lett.* **81** 725.
- [97] Orlandini E and Whittington S G 2007 Statistical topology of closed curves: some applications in polymer physics *Rev. Mod. Phys.* **79** 611-642.

- [98] Orlandini E, Tesi M C, Whittington S G, Sumners D W and Janse van Resburg E J 1994 The writhe of a self-avoiding walk *J. Phys. A:Math. Gen.* **27** L333-L338.
- [99] Orlandini E, Tesi M C and Whittington S G 2000 Polymer Entanglement in Melts *J. Phys. A: Math. Gen.* **33** L181-6.
- [100] Orlandini E and Whittington S G 2004 Entangled polymers in condensed phases *J. Chem Phys.* **121** No 23 12094-99.
- [101] Panagiotou E., Millett K. C. and Lambropoulou S.,2010, *J. Phys. A: Math. Theor.*,**43**,045208.
- [102] Panagiotou E., Tzoumanekas C., Lambropoulou S., Millett K. C. and Theodorou D. N., 2011, A study of the entanglement in systems with periodic boundary conditions *Prog. Theor. Phys. Supplement* **191** pp.172-181.
- [103] Panagiotou E., Millett K. C. and Lambropoulou S., 2012, Quantifying entanglement of collections of chains in periodic boundary conditions models *Procedia IUTAM: Topological Fluid Dynamics II* (accepted).
- [104] Pant P. and Theodorou D.,1995,*Macromolecules*,**28**,7224.
- [105] Pippenger N. 1989 Knots in random walks *Discrete Appl. Math.* **25** 273-278.
- [106] Plunkett P., Piatek M., Dobay A., Kern J., Millett K., Stasiak A. and Rawdon E. 2007 Total Curvature and Total Torsion of Knotted Polymers *Macromolecules* **40** 3860-67.
- [107] Przytycki J and Traczyk P 1987 Conway algebras and skein equivalence of links *Proc. Amer. Math. Soc.* **100** 744-48.
- [108] Qin J. and Milner S. T. 2011 Counting polymer knots to find the entanglement length *Soft Matter* **7** 10676-93.
- [109] Randell R.1987 A molecular conformation space (*Studies in Physical and Theoretical Chemistry* vol 54) ed R C Lacher (Elsevier Science Amsterdam/Elsevier) pp. 125-140.
- [110] Randell R. 1987 Conformation spaces of molecular rings *Studies in Physical and Theoretical Chemistry* vol 54) ed R C Lacher (Elsevier Science Amsterdam/Elsevier) pp. 141-156.
- [111] Ricca R. L. 2000 *Towards a complexity measure theory for vortex tangles* Knots in Hellas 98 (Ser Knots Everything World Sci 1).

- [112] Ricca R. L. and Nipoti B. 2010 *Gauss' Linking Number Revisited* *J. Knot Th. Ramif.* **20** 10, 1325-1343.
- [113] Riemann G. T., Arteca G. and Tapia O. 2002 Proteins in vacuo: a connection between mean overcrossing number and orientationally-averaged collision cross section, *J Chem Phys* **4** 4058-64.
- [114] Rogen P. and Fain B. 2003 Automatic classification of protein structure by using Gauss integrals *Proc. Natl Acad. Sci* **100** 119-24.
- [115] Rubinstein M. and Colby R. 2003 *Polymer Physics* (Oxford University Press).
- [116] Rolfsen D. 1976 *Knots and Links* AMS Chelsea Publishing.
- [117] Schieber J. D. 2003 Fluctuations of entanglements in polymer liquids *J. Chem. Phys.* **118** 11 pp5162-66.
- [118] Seifert H., 1934, Uber das Geschlecht von Knoten, *Math. Ann.*, **110**, 571-592.
- [119] Sheng Y-J. and Tsao H-K. 2002 The mobility and diffusivity of a knotted polymer : Topological deformation effect *J. Chem. Phys.* **116** No 23 10523-8.
- [120] Shimura G. 2002 The representations of integers as sums of squares *Amer. J. Math.* **124** 5 pp 1059-1081.
- [121] Simon J. 2009 Long tangled filaments *Proc. Symp. Appl. Math.* **66** 155-182.
- [122] Stasiak A., Dubochet J., Katritch V., and Pieranski P. 1998 *Ideal knots and their relation to the physics of real knots* *Ideal Knots* Stasiak A., Katritch V. and Kauffmann L. H. (World Scientific) 1-19.
- [123] Stein C. 1972 *Proc. 6th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability (Probability Theory)* vol 2 (Berkeley, CA: University California Press) pp.583-602.
- [124] Stephanou P., Baig C., Tsolou G., Mavrantzas V. G. and Kröger M. 2010 Quantifying chain reptation in entangled polymer melts *J. Chem. Phys.* **132** 124904.
- [125] Stump D., Fraser W. and Gates K. 1998 The writhing of circular cross-section rods: Undersea cables to DNA supercoils *Proc R Soc Lond A* **454** 2123-56.
- [126] Sumners D. W. and Whittington S. G. 1988 Knots in self-avoiding walks *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** 1689-94.

- [127] Theodorou D. N., *Variable-Connectivity Monte Carlo Algorithms for the Atomistic Simulation of Long-Chain Polymer Systems* (P.Nielaba, M. Mareschal, G. Ciccotti, Springer-Vwelang Berlin Heidelberg, 2002).
- [128] Theodorou D. N., 1993, *Makromol. Chem. Theory Simul.*, **2**,191.
- [129] Theodorou D. N. and Suter U. W. 1985 Shape of unperturbed Linear Polymers: Polypropylene *Macromolecules* **18** 1206-14.
- [130] Tesi M., Janse van Rensbourg E., Orlandini E. and Whittington S. G. 1994 Knot probability for lattice polygons in confined geometries *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 347-60.
- [131] Tzoumanekas C. and Theodorou D. N.,2006, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **39**,4592.
- [132] Tzoumanekas C. and Theodorou D. N.,2006,*Macromolecules*,**39**,4592.
- [133] Tzoumanekas C., Lahmar F., Rousseau B. and Theodorou D. N.,2009, *Macromolecules*,**42**,7474.
Lahmar F., Tzoumanekas C., Theodorou D. N. and Rousseau B.,2009, *Macromolecules*,**42**,7485.
- [134] Virnau P., Kantor Y. and Kardar M.,2005, *J. Am. Chem. Soc.*,**127**,15102.
- [135] Vologodskii A. V. and Cozzarelli N. R. 1993 Monte Carlo analysis of the conformation of DNA catenanes *J Mol Biol* **232** 1130-40.
- [136] Vologodskii A. 1999 *Circular DNA On-line biophysics textbook* ed. V. Bloomfield. <http://www.biophysics.org/education/vologodskii.pdf>.
- [137] Weber C., Stasiak A., Fleurant M., De Los Rios P. and Dietler G. 2006 Gel electrophoresis of DNA knots in weak and strong electric fields *Biophys. J.* **90** 3100-3105.
- [138] White J. H. and Bauer W. R. 1969 Self-linking and the Gauss integral in higher dimensions *Am J Math* **91** No 3 693-728.
- [139] Whittington S. G. 1992 Topology of polymers *Proc. Symp. Appl. Math.* vol 45 (Providence RI/American mathematical society) pp. 73-95.