
VUOROVAIKUTTAVIEN SATUNNAISKÄVELIJÖIDEN
AUTOKORRELAATIOT JA RAJAPINTOJEN LEVEYS

Perttu Luukko



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO
FYSIIKAN LAITOS

Pro gradu -tutkielma

Ohjaajat:

Juha Merikoski

Otto Pulkkinen

8.8.2008

Kiitokset

Vaikka pro gradu -tutkielma on pohjimmiltaan yksilösuoritus, ei sen tekeminen onnistuisi tyhjiössä täysin vailla ympäristön tukea. Erityisesti haluan kiittää ohjaajiani Juha Merikoskea ja Otto Pulkista, jotka johdattivat minut tähän haastavaan ja mielenkiintoiseen aihepiiriin, ja jotka väsymättä sekä kaikki velvollisuuden rajat ylittäen tukivat minua työhöni liittyvissä ongelmissa. Lisäksi haluan osoittaa kiitokseni koko fysiikan laitokselle työni ulkoisten puitteiden tarjoamisesta. Erityisen kiitoksen ansaitsevat myös rakkaat opiskelijatoverini, joiden hilpeässä seurassa olen saanut aina tarpeen vaatiessa rentoutua. Viimeisenä mutta ei lainkaan vähäisimpänä haluan kiittää puolisoani Sailaa, jonka huolenpitoon olen voinut luottaa koko opiskeluaikani, ja joka aina jaksaa ymmärtää nuoren fyysikon erikoista mielenlaatua.

Tiivistelmä

Tarkastelen pro gradu -työssäni vuorovaikuttavien yksiulotteisten rajapintojen tasapaino-ominaisuuksia kuvaamalla rajapintoja yksinkertaisten satunnaiskävelijöiden poluilla. Keskeisenä tutkimuskohteena työssäni on rajapintojen karheutta kuvaava *leveys*, jolle johdan eksaktin lausekkeen rajapintaa kuvaavan satunnaiskävelijän askelten välisten korrelaatioiden funktiona. Ensimmäisessä tutkimassani mallissa BCSOS-tyyppistä, eli yksikön mittaisista ylös tai alas suuntautuvista askelmista koostuvaa, rajapintaa ajetaan läpäisemätöntä, heijastavaa seinää kohti. Toisessa mallissa kahta BCSOS-tyyppistä rajapintaa ajetaan toisiaan kohti vaatien, että rajapinnat eivät voi ohittaa toisiaan. Tämän mallin erityispiirteenä on, että *leveys* riippuu epämonotonisesti rajapintojen välisen ajon voimakkuudesta siten, että rajapinnan leveydellä on selkeä rajapinnan koosta riippuva minimi. Hyödyntämällä Monte Carlo -simulaatioita, analyttisiä havaintoja sekä askelten välisten korrelaatioiden symbolista laskentaa esitän eksaktin lausekkeen seinän kanssa vuorovaikuttavan rajapinnan leveydelle satunnaiskävelijäkuvassa. Lisäksi vastaavien menetelmien avulla johdan kahden kävelijän mallin leveydelle approksimatiivisen lausekkeen, jonka avulla osoitan leveyden minimin sekä minimiä vastaavan ajovoimakkuusparametrin skaalautuvan rajapinnan koon L mukana potenssilain $\sim L^{-1/3}$ mukaisesti.

Sisältö

1	Johdanto	1
2	Teoreettisia lähtökohtia	3
2.1	Markovin ketjujen alkeita	3
2.2	Generoivat funktiot	7
3	Tutkittavat mallit ja suureet	9
3.1	Rajapinnat	9
3.2	Satunnaiskävely rajapinnan kuvana	11
3.3	BCSOS- ja RSOS-ehtoja vastaavat satunnaiskävelijät	13
3.4	Rajoitettu BCSOS-kävelijä	14
3.5	TwinBCSOS-malli	16
3.6	Rajapintojen ja satunnaiskävelyn leveys	19
3.7	Satunnaiskävelijöiden autokorrelaatiot	20
4	Numeeriset menetelmät	21
4.1	Satunnaiskävelyn Monte Carlo -simulointi	21
4.2	Korrelaattorien symbolinen laskenta	22
5	Tulokset	25
5.1	Binääripolkujen kombinatoriikka	25
5.2	Leveyden yhteys askelkorrelaattoriin	29
5.3	Yksinkertaisten kävelijöiden askelkorrelaattori ja leveys	31
5.4	Rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattori ja leveys	32
5.5	TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattori ja leveys	35
6	Johtopäätökset	51
	Viitteet	53
	Liite A Merkintöjä	56
	Liite B Rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorit	57
	Liite C TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattorit	58
	Liite D Symbolisesti laskettujen rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorien polynomiosan nollakohdat	59
	Liite E Symbolisesti laskettujen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattorien polynomiosan nollakohdat kompleksitasossa	61

1 Johdanto

Monia komponentteja tai faaseja sisältävissä järjestelmissä mielenkiintoisimmat ja toisaalta myös monimutkaisimmat ilmiöt liittyvät usein järjestelmässä olevien rajapintojen käyttäytymiseen. Syvällä yhden faasin hallitsemassa alueessa järjestelmän käyttäytyminen on tyypillisesti yksinkertaista ja lokaalin tasapainon mielessä vakaata. Eri faasien rajalla sen sijaan tasapaino väistyy epäjärjestyksen ja epälineaarisuuden tieltä, kun faaseja erottavan rajapinnan liike, kasvu ja fluktuaatiot hallitsevat yhä tiukemmin järjestelmän lokaalia energetiikkaa. Fysikaalisena järjestelmänä rajapinta on varsin haastava tutkimuskohde, sillä kyseessä on ajasta riippuva järjestelmä, jonka aikakehityksessä on mukana hyvin voimakas satunnainen elementti. Erityisen haastavaksi rajapintojen teoreettinen tarkastelu käy, mikäli samassa järjestelmässä on useita rajapintoja, jotka kytkeytyvät toisiinsa jollain epätriviaalilla tavalla.

Tämän työn tarkoituksena on luoda silmäys vuorovaikuttavien rajapintojen ilmiömaailmaan käyttämällä ajan suhteen keskiarvoistettujen yksiulotteisten rajapintojen kuvana *satunnaiskävelijöitä*. Kuvittele hiukkanen, joka liikkuu yhdessä ulottuvuudessa satunnaisin, kumpaan tahansa suuntaan suuntautuvien hyppäyksin. Tämänkaltaista liikettä kutsutaan satunnaiskävelyksi. Kuvittele mielessäsi kuvaaja, johon on piirretty hiukkasen paikka ajan funktiona. Hiukkasen liikerata muodostaa satunnaisen, sahalaitaisen kuvion, joka voisi olla jonkin yksiulotteisen rajapinnan hetkellinen muoto. Kun satunnaiskävelyn määräävät säännöt on sopivasti asetettu, tämä muoto vastaa keskimääräisiltä ominaisuuksiltaan jonkin rajapinnan ajan suhteen keskiarvoistettua tilaa. Satunnaiskävelijäapproksimaation kautta rajapintojen käsittely yksinkertaistuu merkittävästi niin teoreettisesti kuin numeerisestikin, ja erityisesti näin päästään tarkastelemaan rajapintojen keskimääräisiä ominaisuuksia myös useamman rajapinnan tapauksessa ilman kohtuuttomia teoreettisia ponnistuksia.

Yksi keskeisimmistä rajapintojen käyttäytymiseen liittyvistä suureista on *leveys*, joka kuvaa rajapinnan keskimääräistä karheutta. Leveys karakterisoi konkreettisesti tavalla rajapinnan muotoa, ja lisäksi monet rajapintojen mielenkiintoisimmat ominaisuudet kuten erilaiset saturaatioilmiöt ja universaalit skaalausominaisuudet koskevat juuri leveyttä. Leveyden käyttäytymisestä usean vuorovaikuttavan rajapinnan tapauksessa on kuitenkin vain vähän tietoa sen käsittelyyn liittyvien hankaluuksien vuoksi. Tämän tutkielman tavoitteena on tarkastella leveyttä satunnaiskävelijämallien kautta kahdessa vuorovaikuttavien rajapintojen perustapauksessa, jotka ovat kovan seinän läheisyydessä liikkuva rajapinta sekä kaksi rajapintaa, jotka eivät voi ohittaa toisiaan.

2 Teoreettisia lähtökohtia

Ennen varsinaisia tutkimuskohteita ja -menetelmiä on syytä esitellä lyhyesti jatkossa käytettävää teoriaa. Satunnaiskävelijöiden tutkimiseen tarvittava perusformalismi saadaan stokastisista prosesseista, joista alakappaleessa 2.1 keskitytään erityisesti niiden erikoistapaukseen, Markovin ketjuihin. Lisäksi alakappaleessa 2.2 esitellään lyhyesti generoivat funktiot, jotka osoittautuvat jatkossa varsin hyödylliseksi apuvälineeksi rekursioyhtälöiden ratkaisemisessa. Esitietoina teoriaosassa oletetaan perustiedot todennäköisysteoriasta (ks. esim. [1–4]), ja lisäksi generoivien funktioiden yhteydessä hyödynnetään joitain kompleksianalyysin perustuloksia. Generoivien funktioiden perusidean voi kuitenkin ymmärtää myös tuntematta näiden tulosten syvällisempää olemusta. Tutkielman laadinnassa on myös muilta osin pyritty siihen, että tutkimuksen ja sen tulosten ymmärtäminen ei vaadi teorian matemaattisten hienouksien perinpohjaista ymmärrystä. Käytettyjä merkintöjä on selitetty liitteessä A.

2.1 Markovin ketjujen alkeita

Teorian kannalta keskeisin myöhemmin esiteltävien rajapintamallien ominaisuus on se, että niiden aikakehityksessä on voimakas satunnainen elementti. Lähtökohdan tämänkaltaisen ei-deterministisen dynamiikan matemaattiseen kuvailuun antaa *stokastinen prosessi*, eli indeksoitu joukko $\{X_\tau\}_\tau$ satunnaismuuttujia, joista kukin muuttuja X_τ kuvaa tarkasteltavan järjestelmän tilaa tietyllä ajanhetkellä τ . Kukin satunnaismuuttuja X_τ saa arvoja jostain yhteisestä arvojoukosta, prosessin *tilajoukosta* E , joka näin siis määrää ne tilat, joissa prosessi voi olla. Näin saadaan formaalit työkalut, joilla voidaan käsitellä käsitteitä kuten ”Todennäköisyys, että järjestelmä on tilassa i hetkellä τ ” tai ”Todennäköisyys, että järjestelmä ei koskaan esiinny tilassa i tai j , kun tiedetään, että se hetkellä τ on tilassa k ”. Tässä työssä käsitellään vain diskreetin ajan prosesseja, eli prosesseja, joissa ajan roolissa oleva indeksi kulkee pitkin ei-negatiivisia kokonaislukuja. Erikoistapauksena diskreetin ajan stokastisista prosesseista esitellään Markovin ketjut, joiden avulla saadaan riittävät välineet useimpien satunnaiskävelijöiden tutkimiseen. Tässä esitetty lyhyt johdanto Markovin ketjuihin noudattelee pääosin P. Brémaudin aihetta käsittelevää teosta [5].

Triviaaliesimerkki stokastisesta prosessista on luonnollisesti tapaus, jossa satunnaismuuttujat X_n ovat riippumattomia toisistaan. Mielenkiintoista dynamiikkaa syntyy kuitenkin vain tilanteissa, joissa prosessilla on *muisti*, eli prosessin käyttäytyminen hetkellä n riippuu siitä, missä tilassa prosessi oli aikaisemmilla hetkillä $n - 1, n - 2, \dots$. On ehkä syytä huomauttaa, että tässä riippuvuudella tarkoitetaan riippuvuutta todennäköisyyksien mielessä, eli prosessin historia ei suoranaisesti määrää järjestelmän tilaa seuraavalla ajanhetkellä, vaan ne todennäköisyydet, joilla kukin tila seuraavaksi esiintyy. Yksinkertaisin – mutta samalla keskeisin – erikoistapaus muistillisista prosesseista ovat niin sanotut *Markovin*

*ketjut*¹, eli prosessit, joiden muisti ulottuu vain nykyiseen ajanhetkeen. Näin siis Markovin ketjun ollessa tietyllä hetkellä tietyssä tilassa seuraavaa askelta koskevat todennäköisyydet eivät riipu ketjun aikaisemmasta historiasta. Markovin ketjun sanotaan lisäksi olevan homogeeninen Markovin ketju (HMK), mikäli prosessi ”ei muista ikäänsä”, eli mikäli todennäköisyys siirtyä tietystä tilasta hetkellä n tiettyyn tilaan hetkellä $n + 1$ ei riipu indeksistä n . Tämän muistiominaisuuden lisäksi Markovin ketjulta tyypillisesti vaaditaan, että sen tilajoukko E on korkeintaan numeroituva.

Koska markovisen prosessin kehityksessä ei ole riippuvuuksia prosessin varhaisemmasta historiasta, ketjun dynamiikka määräytyy täysin tilojen välisistä *siirtymätodennäköisyyksistä* $\mathbb{P}(X_{n+1} = j | X_n = i)$. Homogeenisen Markovin ketjun tapauksessa nämä siirtymätodennäköisyydet ovat lisäksi samat kaikille n , jolloin todennäköisyyttä siirtyä tilasta i tilaan j voidaan merkitä lyhyesti $p_{ij} \in [0, 1]$.

Homogeenisen Markovin ketjun siirtymätodennäköisyydet voidaan edelleen koota yhteen ketjun *siirtymämatriisiksi*² $\mathbf{P} = \{p_{ij}\}_{i,j \in E}$. Kun homogeenisen ketjun siirtymätodennäköisyydet sekä ketjun tila jollain hetkellä tunnetaan, ketjulle saadaan yksinkertainen siirtymämatriisin virittämä ”liikeyhtälö”. Tässä vaiheessa ketjun tilan käsitettä voidaan kätevästi laajentaa sisältämään tilanne, jossa tarkasteluhetkellä tiedetään jonkin tilajoukon tilan $i \in E$ sijasta vain jokin ketjun mahdollisia tiloja kuvaava todennäköisyysjakauma. Tämän voi mieltää siten, että tarkastelun kohteena on suuri joukko – statistisen fysiikan kielellä *ensemble* – riippumattomia ketjuja, joiden tilat jollain hetkellä noudattavat annettua jakaumaa. Kun ketjun tilojen todennäköisyysjakauma hetkellä n esitetään *jakaumavektorina* σ_n , jonka komponentit ovat $\sigma_n(i) := \mathbb{P}(X_n = i)$, ketjun tilojen jakauman aikakehitys voidaan esittää yksinkertaisesti muodossa

$$\sigma_{n+1}^T = \sigma_n^T \mathbf{P}. \quad (2.1)$$

Iteroimalla tätä relaatiota m kertaa saadaan $\sigma_{n+m}^T = \sigma_n^T \mathbf{P}^m$. Matriisin \mathbf{P}^m alkio (i, j) antaa siis todennäköisyyden siirtyä tilasta i tilaan j täsmälleen m :llä askeleella, eli todennäköisyyden $\mathbb{P}(X_{n+m} = j | X_n = i)$. Merkitään tätä useamman askeleen siirtymätodennäköisyyttä lyhyesti $p_{ij}(m)$. Erityisesti yhtälöä (2.1) iteroimalla saadaan $\sigma_n^T = \sigma_0^T \mathbf{P}^n$, eli kun alkutilan jakauma σ_0 ja \mathbf{P} tiedetään, homogeenisen ketjun tilojen todennäköisyysjakauma kaikkina ajanhetkinä on täysin määrätty.

Keskeinen käsite liittyen HMK:n aikakehitykseen on *stationaarinen jakauma*, eli todennäköisyysjakauma, joka säilyy muuttumattomana siirtymämatriisin käsitteilyssä. Stationaariseen jakaumaan päädyttyään ketju on siis tilojen todennäköisyysjakauman mielessä eräänlaisessa tasapainossa, jossa se pysyy ikuisesti. Kyseessä on siis jakauma π jolle pätee

$$\pi^T = \pi^T \mathbf{P} \quad \text{eli} \quad \pi(i) = \sum_{j \in E} \pi(j) p_{ji} \quad \text{kaikille } i \in E. \quad (2.2)$$

¹ Andrei Andrejevitsj Markov (1856–1922), venäläinen matemaatikko.

² Tarkalleen ottaen siirtymämatriisi ei välttämättä ole matriisi tavanomaisessa mielessä, sillä E voi olla numeroituvasti ääretön.

Tätä stationaarisen jakauman määrittelevää yhtälöä kutsutaan myös *globaaliksi tasapainoyhtälöksi*. Koska π on todennäköisyysjakauma, siltä vaaditaan lisäksi $\pi(i) \in [0,1]$ kaikille $i \in E$ sekä normitusehto $\sum_{i \in E} \pi(i) = 1$.

Homogeenisen Markovin ketjun aikakehityksen osalta tärkeää on myös se, kuinka vapaasti ketju voi tilajoukossaan vaeltaa. Voi esimerkiksi olla, että päätyessään tilaan i ketju pysyy tässä tilassa ikuisesti, tai korkeintaan vaihtelee tilan i ja tilan j välillä. Tämänkaltainen ketjun "jumiutuminen" tiettyyn tilajoukon osajoukkoon voi tehdä ketjun aikakehityksestä varsin monimutkaista, joten on syytä hahmottaa ketjun mahdollisia siirtymiä hieman laajemmin. Mikäli $p_{ij}(n) > 0$ jollain n , eli mikäli ketju voi jollain positiivisella todennäköisyydellä päätyä tilasta i tilaan j , sanotaan tilan j olevan *saavutettavissa* tilasta i . Mikäli tämä yhteys on kaksisuuntainen, sanotaan tilojen i ja j olevan *yhteydessä toisiinsa*. Osoittautuu, että tämä relaatio on ekvivalenssirelaatio, eli relaation avulla ketjun tilajoukko voidaan osittaa yksikäsitteisesti *yhteyksiluokiksi* eli pistevieraiksi osajoukoiksi, joiden kaikki tilat ovat yhteydessä toisiinsa. Yhteyksirelaatiolla osittelusta seuraa myös se, että mikäli ketju poistuu jostain yhteyksiluokasta, se ei voi koskaan palata sinne takaisin. Tällöin ketjun siirtyessä pois yhteyksiluokasta sen tilajoukko ikään kuin efektiivisesti redusoituu pienemmäksi joukoksi. Mikäli tällaista redusoitumista ei voi tapahtua, eli mikäli ketjun koko tilajoukko on itsessään yksi yhteyksiluokka, ketjun sanotaan olevan *redusoitumaton*. Tällöin siis ketjun tämänhetkisestä tilasta riippumatta ketju voi tulevaisuudessa päätyä jollain positiivisella todennäköisyydellä mihin tahansa ketjun tilajoukon tilaan.

Usein sovellusten kannalta kiintoisaa ei ole niinkään sellainen kehitys, jossa prosessi siirtyy jatkuvasti uusiin tiloihin. Ensinnäkin, monissa sovelluksissa prosessin tilajoukko on äärellinen, jolloin prosessi joutuu väistämättä ennen pitkää palaamaan sellaiseen tilaan, jossa se on jo ollut. Toiseksi, vaikka jonkin prosessin matemaattisessa mallissa tilajoukko olisikin ääretön (kuten yleensä satunnaiskävelijöiden tapauksessa), äärettömyyksiin karkaavat prosessit vastaavat usein epävakaita, ei-toivottuja ilmiöitä. Prosessin hallinnan kannalta on siis suotavaa, että prosessi palaa lopulta takaisin työstämään samaa tilajoukon aluetta. On siis oleellista tietää, millä todennäköisyydellä ja etenkin millä aikaskaalalla tällainen palautuminen tapahtuu.

Keskeinen satunnaismuuttuja tilojen toistumiseen liittyen on tilaa vastaava *paluu-aika*, joka tarkoittaa nimensä mukaisesti sitä aikaa, jossa tilasta i aloittava ketju palaa ensimmäistä kertaa takaisin lähtötilaan i . Muodollisesti kyseessä on siis satunnaismuuttuja

$$T_i := \min \{n \geq 1 \mid X_n = i \text{ kun } X_0 = i\}, \quad (2.3)$$

missä sovitaan, että $T_i = \infty$ jos $X_n \neq i$ kaikille $n \geq 1$.

Tilan paluu-aikaa voi rajoittaa ketjun siirtymien syklinen rakenne. Voi nimittäin olla, että tietty tila voi toistua vain tietyn mittaisissa jaksoissa. Tilan i jakso d_i määritellään

$$d_i := \text{syt} \{n \geq 1 \mid p_{ii}(n) > 0\}, \quad (2.4)$$

missä sovitaan, että $d_i = \infty$ jos $p_{ii}(n) = 0$ kaikille $n \geq 1$. Jos $d_i = 1$, sanotaan tilan i olevan *jaksoton*. Voidaan osoittaa, että saman yhteysluokan tiloilla on aina sama jakso [5, s. 74]. Näin ollen voidaan puhua myös yhteysluokan tai redusoitumattoman ketjun jaksosta tai jaksottomuudesta.

Paluuajansa jakauman perusteella tilat voidaan luokitella *toistuviin* ja *poistuviin* tiloihin sen mukaan, palaako ketju melkein varmasti lopulta tilaan takaisin vai ei. Tilan i sanotaan olevan toistuva, mikäli $\mathbb{P}(T_i < \infty) = 1$, eli mikäli tilasta i aloittava ketju palaa melkein varmasti kyseiseen tilaan jonain tulevana hetkenä. Mikäli tila ei ole toistuva, eli mikäli positiivisella todennäköisyydellä ketju ei koskaan palaa tilaan i , sanotaan tilan olevan poistuva. Toistuvat tilat voidaan edelleen paluuajan odotusarvon perusteella jaotella siten, että toistuva tila on *positiivisesti toistuva* mikäli $\mathbb{E}(T_i) < \infty$, ja muussa tapauksessa *nollatoistuva*. Voidaan osoittaa [5, s. 100], että jakson tavoin myös palautuvuus on yhteysluokan tilojen yhteinen ominaisuus, eli redusoitumattoman ketjun tapauksessa voidaan puhua palaavasta tai positiivisesti palaavasta ketjusta. Intuitiivisesti on selvää, että jos ketjun tiloja on vain äärellinen määrä, on redusoitumattoman ketjun ennen pitkää pakko palata takaisin tiloihin, joissa se on jo vierailut. Voidaankin helposti osoittaa, että redusoitumaton HMK äärellisessä tilajoukossa on aina positiivisesti palaava [5, s. 105].

Redusoitumattoman ketjun tapauksessa palaavuus voidaan osoittaa myös helpommin seuraavan tuloksen [5, s. 104][2, s. 208] avulla määrittämättä yhdenkään tilan paluuaikaa.

Lause 1 (Stationaarinen jakauma ja palaavuus). *Redusoitumaton HMK on positiivisesti palaava jos ja vain jos sillä on stationaarinen jakauma. Edelleen, mikäli stationaarinen jakauma on olemassa, se on yksikäsitteinen.*

Myöhemmissä kappaleissa tilan paluu aika ilmaantuu esiin satunnaiskävelijän kuplakokojakauman muodossa, ja seuraava tulos [5, s. 104][2, s. 210] helpottaa suuresti paluuajan odotusarvon laskemista.

Lause 2 (Stationaarisen jakauman paluu aikaesitys). *Olkoon π redusoitumattoman, positiivisesti palaavan HMK:n stationaarinen jakauma. Tällöin $\mathbb{E}(T_i) = \pi(i)^{-1}$.*

2.2 Generoivat funktiot

Hyvin monenlaisissa todennäköisyyslaskennan ja kombinatoriikan ongelmissa hyödyllinen generoivien funktioiden menetelmä saa alkunsa – hieman yllättäen – kompleksianalyysistä. Olkoon X satunnaismuuttuja, jonka arvot ovat ei-negatiivisia kokonaislukuja, ja olkoon $p_n := \mathbb{P}(X = n)$. Tällöin, koska aina $0 \leq p_n \leq 1$, kompleksista potenssisarjaa $\sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n$ voidaan arvioida ylhäältä geometrisella sarjalla $\sum_{n=0}^{\infty} z^n$, joka suppenee lokaalisti tasaisesti kompleksitason origokeskisessä yksikkökiekossa $D(0, 1) = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| < 1\}$. Näin ollen myös sarja $\sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n$ suppenee lokaalisti tasaisesti ja määrittelee siten analyttisen funktion

$$G : D(0, 1) \rightarrow \mathbb{C}, \quad G(z) = \mathbb{E}(z^X) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n,$$

eli jakauman (p_n) generoivan funktion, ja erityisesti tämä G :n potenssisarjaesitys on yksikäsitteinen. Monissa tilanteissa annetuista oletuksista on helpompi määrittää G kuin laskea suoraan koko jakauma (p_n) . Potenssisarjaesityksen yksikäsitteisyyden nojalla jakauma (p_n) voidaan tämän jälkeen täysin määrätä yksinkertaisesti kehittämällä G potenssisarjaksi. Edelleen, generoivasta funktiosta voidaan määrittää myös X :n odotusarvo, sillä

$$G'(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dz}(p_n z^n) = \sum_{n=1}^{\infty} n p_n z^{n-1} \xrightarrow{z \rightarrow 1^-} \sum_{n=1}^{\infty} n p_n = \mathbb{E}(X),$$

missä rajankäynti perustuu *Abelin lauseeseen* [5, s. 419] ja tietoon, että sarja suppenee pisteessä $z = 1$, sillä $\sum_{n=0}^{\infty} p_n = 1$. Vastaavasti G :n korkeammista derivaatoista saadaan X :n korkeammat momentit ja siten esimerkiksi sen varianssi. Generoiva funktio on siis eräänlainen tiivistetty esitys, joka sisältää kaiken tiedon taustalla olevasta todennäköisyysjakaumasta.

Generoivia funktioita voidaan myös käyttää yleisten lukujonojen yhteydessä. Kun (a_n) on lukujono, sen generoivaksi funktioksi kutsutaan potenssisarjaa $\sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$. Yleisessä tapauksessa kannattaa kuitenkin huomata, että edellä määritelty sarja on vain muodollinen potenssisarja, eli se ei välttämättä suppene kuin pisteessä $z = 0$. Kun lukujono (a_n) ei kasva liian rajusti, tämä potenssisarja kuitenkin suppenee lokaalisti tasaisesti jossain kompleksitason origokeskisessä kiekossa $D(0, r)$, missä potenssisarjan *suppenemissäde* on

$$r = \liminf_{n \rightarrow \infty} |a_n|^{-\frac{1}{n}}.$$

Kun $r > 0$, potenssisarja määrittelee kompleksitason kiekossa $D(0, r)$ analyttisen funktion $G(z)$, jonka sarjaesityksen yksikäsitteisyyttä voidaan jälleen käyttää alkuperäisen lukujonon (a_n) yleisen termin ratkaisemiseen. Erityisesti kun lukujonosta (a_n) tunnetaan vain jokin rekursiorelaatio, on annetuista lähtökohdista usein merkittävästi helpompaa ratkaista funktion $G(z)$ lauseke ja tästä sarjaksi kehittämällä a_n kuin ratkaista lukujonon yleinen termi suoraan.

3 Tutkittavat mallit ja suureet

3.1 Rajapinnat

Yleisimmillään fysikaalisessa järjestelmässä esiintyvä rajapinta voi olla lähes mikä tahansa $(d - 1)$ -ulotteinen rakenne d -ulotteisessa avaruudessa. Tässä työssä kuitenkin rajoitutaan yksiulotteisiin rajapintoihin, jotka siis syntyvät kaksiulotteisessa järjestelmässä olevien faasien väliin. Yksiulotteisuus yksinkertaistaa rajapintojen teoreettista käsittelyä merkittävästi, mutta myös monet korkeampiulotteisille malleille oleelliset ilmiöt näkyvät jo yhdessä ulottuvuudessa. Kuten fysiikan tutkimuksessa yleensä, myös tässä työssä pyritään ensisijaisesti tavoittamaan oleellinen fysiikka mahdollisimman yksinkertaisen teoreettisen mallin kautta. Toinen rajapintojen teoreettista tarkastelua helpottava rajoitus koskee rajapintojen muotoa. Vaikka rajapinta eläisi vain kaksiulotteisessa avaruudessa ja vaikka sopivilla oletuksilla estettäisiin suurimmat, puhtaasti matemaattiset patologiat, voi rajapinnalla olla hyvin monimutkaista, onkaloista ja ulokkeista koostuvaa sisäistä rakennetta. Tämän vuoksi rajapinnan muodolle tyypillisesti asetetaan hyvinkin tiukkoja ehtoja – jälleen kerran tavoitteena löytää oleellisen fysiikka ja keskeisimmät ilmiöt. Nämä ehdot kumpuavat siitä fysikaalisesta perusajatuksesta, että rajapinnat ovat usein mesoskoopillisella tasolla ”lähes laakeita”, sillä erilaiset ulokkeet ja monimutkaiset sykkyrät ovat energeettisesti epäedullisia ja siten fysikaalisesti vähemmän oleellisia.

Yksiulotteisuuden jälkeen ensimmäinen ja tärkein tässä työssä rajapinnoille asetettava rajoitus on niin sanottu SOS-ehto [6] (*solid-on-solid*). SOS-ehto estää rajapintaa muodostamasta ulokkeita ja taskuja vaatimalla, että rajapintaa voidaan kuvata (yksiulotteisessa tapauksessa) yhden muuttujan funktion graafilla. Jos rajapinta siis kulkee vaaka-akselin suuntaan, kussakin vaaka-akselin kohdassa rajapinnalla on yksikäsitteisesti määrätty korkeus. Koska ulokkeet ja taskut ovat tyypillisesti energeettisesti epäedullisia, tämä on yleensä varsin kohtuullinen approksimaatio. Rajapintojen teoreettinen käsittely kuitenkin helpottuu todella merkittävästi, kun rajapinnan hetkellistä muotoa voidaan kuvata yleisen käyrän sijasta yhden muuttujan funktiolla.

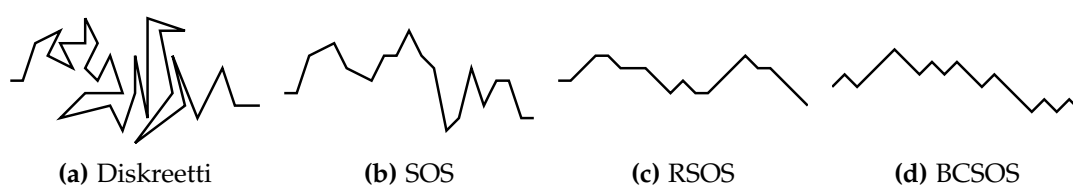
Kun rajapinnalle on asetettu SOS-ehto ja rajapinnan tilaa siten kuvaa rajapinnan korkeus $h(x, t)$ vaakasuuntaisen koordinaatin ja ajan funktiona, suoraviivaisin tapa kuvata rajapinnan käyttäytymistä on rakentaa fysikaalisista lähtökohdista käsin liikeyhtälö funktiolle h . Koska fysikaalisissa tilanteissa rajapinnan kasvussa on lokaalilla tasolla yleensä mukana voimakas satunnainen elementti, rajapintojen liikeyhtälöt tyypillisesti sisältävät satunnaista kohinaa kuvaavan termin, eli ne ovat stokastisia differentiaaliyhtälöitä. Esimerkki tällaisesta rajapinnan lokaalia kasvua hallitsevasta kaaoksesta on kiinteä-kaasu -rajapinnalla tapahtuva kiinteän faasin molekyylien evaporaatio höyryyn sekä höyrymolekyylien adsorptio kiinteän aineen pinnalle. Vaikka molempia näistä prosesseista voidaan suuressa skaalassa kuvata yksinkertaisesti rajapinnan globaalilla kasvunopeudella, mikrotasolla ne

käyttäytyvät varsin satunnaisesti. Kohinan lisäksi funktion h liikeyhtälöön voidaan lisätä esimerkiksi rajapinnan muotoa tasoittava ”pintajännitystermi” $\propto \nabla^2 h$, jolloin saadaan niin sanottu Edwardsin–Wilkinsonin malli (EW) [7]. Toinen hyvin paljon tutkittu malli on niin sanottu KPZ-malli [8], joka lisää EW-yhtälöön epälineaarisen termin $\propto (\nabla h)^2$, joka kuvaa sitä, että rajapinnan kasvu tapahtuu esimerkiksi edellä mainitulla kiinteän ja kaasumaisen aineen rajapinnalla nimenomaan pinnan lokaalin normaalin suunnassa. Laajemman johdatuksen rajapintojen kasvuun ja erilaisten kasvumallien fysikaaliseen perustaan antavat esimerkiksi Barabási & Stanley [9] sekä Halpin-Healy & Zhang [10]. Mallien kuten KPZ on todettu kuvaavan monenlaisia fysikaalisia rajapintailmiöitä, mutta yhtälöiden yksinkertaisuudesta huolimatta etenkin mallien stokastisuus tekee niiden teoreettisesta käsittelystä varsin monimutkaista. Tästä syystä yksiulotteistenkin rajapintojen kasvuun liittyy vielä lukuisia avoimia kysymyksiä.

Globaalien liikeyhtälöiden lisäksi rajapintojen kasvu voidaan tarkastella myös suoraan mikroskopiasta käsin. Esimerkiksi jo mainittua kiinteä–kaasu -rajapintaa voidaan kuvata diskreetillä hilalla, jonka kukin hilapiste on joko atomin miehittäjä tai tyhjä. Eri faaseja kuvaavat tässä tapauksessa hilan tiheään ja harvaan miehitettyt alueet. Aikakehitys tällaisten faasien väliselle rajapinnalle saadaan siten, että rajapinnan kohdalla hilapisteet voivat kullakin aika-askeleella vaihtaa miehitystä jonkin säännön mukaan. Esimerkiksi kiinteä faasi voi kasvaa siten, että uusi ainehiukkanen tarttuu miehitetyn alueen reunaan tietyillä, kyseisen hilapisteen lähinaapureista riippuvilla todennäköisyyksillä. Näin saadaan yksinkertaiset säännöt, jotka kuvaavat rajapinnan kasvuun mikroskooppisella tasolla. Tällaiset mallit ovat hyvin otollisia käyttökohteita etenkin tietokonesimulaatioille, joilla mikroskooppista kasvuun voidaan toistaa miljoonia aika-askeleita tietyistä alkuehdoista lähtien, ja siten voidaan nähdä mikroskooppisen kasvun aiheuttama globaalin tason aikakehitys. Eräs tietokonesimulaatioista nähtävä ilmiö on erilaisten rajapintamallien *universaalisuus*, eli että hyvin erilaisista lähtökohdista johdetut rajapintateoriat, kuten KPZ-yhtälö ja erilaiset mikroskooppiset mallit, johtavat jopa kvantitatiivisella tasolla hyvin samanlaiseen suuren mittakaavan käyttäytymiseen.

Hyvin rikasta globaalia käyttäytymistä saadaan jo yllättävän yksinkertaisten mikroskooppisten mallien kautta. Eräs tällainen varsin yksinkertainen malli on RSOS (*restricted solid-on-solid*) [11], jossa SOS-ehdon lisäksi rajapinnan lokaalia jyrkkyyttä rajoitetaan vaatimalla, että vierekkäisten hilapisteiden välillä rajapinnan korkeusero on korkeintaan yhden hilayksikön verran. Rajapintaa tasoittava ”pintajännitys” siis ikään kuin sisällytetään mikroskooppisen tason kasvulakiin vaatimalla, että $\Delta h \in \{-1, 0, 1\}$. Kun lyhyen mittakaavan konfiguraatioiden määrää näin rajoitetaan, ja kun mikroskooppiseen kasvuun liittyvien todennäköisyyksien katsotaan riippuvan vain kasvupisteen lähinaapureista, riittää RSOS-mallin aikakehityksen parametrisoimiseen vain muutama riippumaton parametri. Konfiguraatioita voidaan edelleen rajoittaa tiukemmalla, niin sanotulla BCSOS-ehdolla (*body-centered solid-on-solid*) [12], jossa rajapinnan vierekkäisten hilapisteiden välil-

lä oleva korkeusero voi olla vain ± 1 . RSOS- ja BCSOS-ehtoja sekä niiden suhdetta aikaisempaan SOS-ehtoon on esitelty kuvassa 1. Vaikka nyt ollaan tultu hyvin pitkä matka yleisistä rajapinnoista, myös yksinkertaisimmalla BCSOS-mallilla on monia mielenkiintoisia ja varsin epätriviaaleja ominaisuuksia, ja yksinkertaisimmillakin malleilla voidaan tavoittaa hyvin monia fysikaalisia ilmiöitä. Esimerkiksi RSOS- ja BCSOS-mallien tiedetään olevan KPZ-mallin universaalisuusluokassa [13, 14], eli niiden kasvu toteuttaa samanlaiset suuren mittakaavan skaalausominaisuudet. Tässä heijastuu se kaiken fysikaalisen ajattelun taustalla oleva totuus, että yksityiskohdat eivät läheskään aina ole oleellisia, vaan vain tietyt yksinkertaiset lähtökohdat ja symmetriat säilyttämällä saadaan katettua suurin osa laajan mittakaavan ilmiöistä.



Kuva 1. Yksiulotteisten rajapintojen muotoja rajoittavia ehtoja. Rajapinnan rajoittaminen kulkemaan vain pitkin jonkin diskreetin neliöhilan pisteitä mahdollistaa silti hyvin monimutkaisen rakenteen (a). Tyypillisesti oletetaan vähintään SOS-rajapintaehto (b), eli että kussakin vaakasuuntaisen koordinaattiakselin pisteessä rajapinnan korkeus on yksikäsitteinen. Tällöin rajapinnan hetkellistä muotoa voidaan kuvata jollain vaakasuuntaisen koordinaatin funktiolla. RSOS-ehdolla (c) rajapintaa rajoitetaan edelleen siten, että peräkkäisten vaakakoordinaatiston pisteiden välillä rajapinnan korkeusero on 0 tai ± 1 . BCSOS-ehdolla (d) tämä ero voi olla vain ± 1 . Ehtojen tiukentuessa rajapintojen teoreettinen käsittely yksinkertaistuu merkittävästi, mutta malli silti yleensä tavoittaa fysiikan kannalta oleelliset ilmiöt tutkittavasta tilanteesta.

3.2 Satunnaiskävely rajapinnan kuvana

Mikäli edellisessä kappaleessa esiteltyjä rajapintamalleja halutaan tarkastella vain paikan funktiona, eli halutaan esimerkiksi tutkia rajapintaa tietyllä hetkellä tai rajapinnan ajan suhteen stationaarista tilaa, on silti otettava huomioon rajapinnan paikkakonfiguraation satunnaisuus. Eräs tapa tuottaa ja tarkastella tällaisia satunnaisia konfiguraatioita on *satunnaiskävelyt*. Satunnaiskävelijöillä on perinteisesti mallinnettu liikettä. Esimerkiksi hiukkasen diffuusiota yhdessä ulottuvuudessa voidaan mallintaa satunnaiskävelyllä, jossa kullakin ajanhetkellä hiukkasen paikkaan lisätään satunnainen hyppäys, joka noudattelee esimerkiksi normaalijakaumaa. Samankaltaisilla malleilla voidaan mallintaa myös vaikkapa eläinpopulaation koon heilahtelua tai pörssikurssien vaihtelua. Kuitenkin jos edellä mainittua yksiulotteista satunnaiskävelyä seurataan tietty aika ja piirretään

hiukkasen paikka ajan funktiona, saadaan käyrä, joka voisi olla esimerkiksi jonkin SOS-tyyppisen rajapinnan hetkellinen muoto. Kun satunnaiskävelyn säännöt on sopivasti valittu esimerkiksi toteuttamaan RSOS- tai BCSOS-tyyppiset muotoehdot, ja kun löydetään jonkinlainen yhteys satunnaiskävelyn parametrien ja vastaavan rajapintamallin parametrien välille, voidaan satunnaiskävelijöillä siis tarkastella esimerkiksi rajapintojen tyypillisiä paikkakonfiguraatioita, rajapinnan spatiaalisia korrelaatioita tai ajan suhteen keskiarvoistettuja ominaisuuksia.

On ilmeistä, että valitsemalla satunnaiskävelyn määräävät säännöt sopivasti voi tuottaa kävelyitä, joiden poluista saadaan lähes minkä tahansa rajapintamallin konfiguraatioita tai ajan suhteen stationaarisia tiloja. Mielenkiintoiseksi rajapintojen tutkimisen satunnaiskävelijän kautta tekee kuitenkin se, että monien rajapintamallien stationaarisia tiloja voidaan kuvata satunnaiskävelyillä, jotka ovat varsin yksinkertaisia – esimerkiksi kappaleessa 2.1 esitellyllä tavalla markovisia. Yksinkertaisia satunnaiskävelyjä, kuten edellisessä kappaleessa esiteltyä riippumattomista askelista koostuvaa kävelyä, karakterisoi diffusiiviselle liikkeelle ominainen paikan neliöpoikkeaman skaalaus $\mathbb{E}(x^2) \sim t$ ajan t funktiona. Tarkemmin sanottuna yksinkertaisen satunnaiskävelyn luoma paikan jakauma on gaussinen, eli edellisen lisäksi esimerkiksi parittomat momentit kuten $\mathbb{E}(x^3)$ ovat nolliä, eli jakauma ei ole vino. Kun rajapintamallin stationaarinen tila toteuttaa samanlaiset ehdot, on se tyypillisesti kuvattavissa yksinkertaisen satunnaiskävelyn avulla. Useimpien rajapintamallien stationaariset tilat sisältävät saman diffusiivisen liikkeen skaalauksen, nyt muodossa $\mathbb{E}(h^2) \sim L$, missä L on rajapinnan lineaarinen koko. Lisäksi esimerkiksi KPZ- ja BCSOS-mallin sekä suuressa osassa parametriavaruuttaan myös RSOS-mallin stationaariset tilat ovat ei-vinoja [14], ja siten erityisesti niitä voidaan kuvata yksinkertaisilla satunnaiskävelyillä. Lisäksi vaikka rajapintamallin stationaarinen tila ei olisi tarkalleen ottaen kuvattavissa yksinkertaisella satunnaiskävelyllä, voi kuvaus kuitenkin olla varsin hyvä approksimaatio esimerkiksi suuressa skaalassa. Satunnaiskävelijäkuvauksen kautta rajapintojen käsittely sekä teoreettisesti että numeerisesti on monin tavoin yksinkertaisempaa. Aikariippuvuuden kadotessa monien eksaktien tulosten johtaminen on merkittävästi helpompaa, ja esimerkiksi skaalaus $\mathbb{E}(h^2) \sim L$ seuraa varsin triviaalisti satunnaiskävelijäkuvauksen kautta. Myös tietokonesimulaatiot yksinkertaistuvat selvästi, sillä kokonaisen rajapinnan ja sen aikakehityksen sijasta riittää usein käsitellä vain satunnaiskävelijän senhetkistä paikkaa.

Tässä tutkielmassa rajapintojen satunnaiskävelijäkuvaus viedään askelta pidemmälle ottamalla koko tarkastelun *lähtökohdaksi* sopiva satunnaiskävely, ja tarkastelemalla sen kautta rajapintamalleille keskeisiä suureita, kuten spatiaalisia korrelaatioita ja rajapinnan leveyttä. Aikakehityksen puutteen suomen yksinkertaisuuden turvin päästään näin tarkastelemaan etenkin haastavaa, vuorovaikeuttavien rajapintojen tapausta. Vaikka jatkossa rajapintojen tarkastelu tehdään yksinomaan satunnaiskävelijän kautta, on syytä muistaa, että kyseessä on aikakehityksen kannalta eräänlainen ensimmäinen approksimaatio, jonka avulla

päästään kurkistamaan alueelle, jonne yksityiskohtaisempi tarkastelu ei yllä. Ennen monimutkaisempia tapauksia palataan kuitenkin hetkeksi taaksepäin BCSOS- ja RSOS-mallien pariin, sillä jatkossa etenkin BCSOS-tyyppinen kävely toimii pohjana monimutkaisempien mallien rakentamisessa.

3.3 BCSOS- ja RSOS-ehtoja vastaavat satunnaiskävelijät

Kappaleessa 3.1 esiteltyt BCSOS- ja RSOS-mallit edustavat ehkä alkeellisimpiä fysikaalisesti mielekkäitä rajapintamalleja. Yksinkertaisuudestaan huolimatta BCSOS- ja RSOS-mallien kaltaiset mikroskooppiset rajapintamallit kuitenkin pitkään muodostivat sen teoreettisen koeympäristön, jossa rajapintafysiikan teorioita kehiteltiin. Yksinkertaisten mikroskooppisten mallien roolia rajapintailmiöiden tutkimuksessa onkin verrattu Ising-mallin asemaan kriittisten ilmiöiden parissa [14].

Vaikka BCSOS- ja RSOS-mallit ovat jo sellaisenaan varsin yksinkertaisia, niiden satunnaiskävelijävastineet ovat vieläkin yksinkertaisempia. Molemmat rajapinnat elävät diskreetissä neliöhilassa, eli vastaavat satunnaiskävelijät ottavat askelia diskreetteinä, tasavälisinä ajanhetkinä. Myös satunnaiskävelijöiden askeleet ovat diskreettejä, ja niitä rajoittavat BCSOS- ja RSOS-ehdot, eli BCSOS-kävelijä voi kullakin hetkellä ottaa askeleen vain alas tai ylös, ja RSOS-kävelijä voi edellisten lisäksi pysyä paikallaan. Lisäksi askeleet oletetaan toisistaan riippumattomiksi, sillä myös rajapintamalleissa mikroskooppisen kasvun tietyssä hilapisteessä oletettiin riippuvan vain rajapinnan suhteellisesta korkeudesta vierekkäisissä hilapisteissä.

Markovin ketjuna kuvattuna kumpikin kävelijä on diskreetin ajan HMK tilajoukossa \mathbb{Z} . BCSOS-ketjun siirtymämatriisin mahdollisesti nollassa eroavat elementit ovat $p_{i,i-1}$ ja $p_{i,i+1}$, joista toinen riittää parametrisoimaan kävelijän siirtymämatriisin täysin. Merkitään $p := p_{i,i-1}$, jolloin $p_{i,i+1} = 1 - p$, ja siten koko kävelyä parametrisoi vain yksi parametri $p \in [0, 1]$. Kun $p = 1/2$, ylös- ja alas-askeleet ovat yhtä todennäköisiä, eli BCSOS-kävelijä ei systemaattisesti ajaudu kumpaankaan suuntaan. RSOS-ketjun siirtymämatriisissa myös termit muotoa $p_{i,i}$ voivat olla nollassa eroavia, ja siten kävelyn parametrisointiin vaaditaan kaksi riippumatonta parametria $p_{\uparrow} := p_{i,i+1}$ ja $p_{\downarrow} := p_{i,i-1}$.

Kun BCSOS- tai RSOS-kävelijän paikkaa hetkellä n kuvaa satunnaismuuttuja X_n , merkitsemällä kävelijän hetkellä n ottamaa askelta satunnaismuuttujalla $\Delta_n = X_{n+1} - X_n$, saatu *askelprosessi* $\{\Delta_n\}$ on täysin muistiton, sillä eri hetkillä otetut askeleet oletettiin toisistaan riippumattomiksi. Koska muistiton prosessi on vielä merkittävästi Markovin ketjuakin yksinkertaisempi tapaus, askelprosessia käyttäen monet BCSOS- ja RSOS-kävelijöihin liittyvät ongelmat helpottuvat selvästi.

Jos BCSOS-ketjun tapauksessa $0 < p < 1$ tai RSOS-ketjun tapauksessa $p_{\uparrow}, p_{\downarrow} \neq 0$, ketjut ovat selvästi redusoitumattomia, sillä siirtymät vierekkäisten tilojen välillä ovat aina mahdollisia molempiin suuntiin. BCSOS-ketju on

lisäksi jaksollinen jaksolla 2, sillä ketjun tila X_n vuorottelee joka askeleella parillisten ja parittomien lukujen välillä, eli esimerkiksi jos $X_0 = 0$, X_n on aina parillinen parillisilla n ja pariton parittomilla n . Palaavuuden osalta on intuitiivisesti selvää, että mikäli kumpikaan kävelijä kokee systemaattista ajautumista jompaan kumpaan suuntaan (eli mikäli $p \neq 1/2$ tai $p_\uparrow \neq p_\downarrow$), ketjut eivät voi olla palaavia. Edelleen voidaan osoittaa (BCSOS-kävelijälle [5, s. 88]), että jos ketjut ovat palaavia, ovat ne nollapalaavia, eli paluujan odotusarvo karkaa äärettömiin.

3.4 Rajoitettu BCSOS-kävelijä

Yksinkertaisiin RSOS- ja BCSOS-kävelijöihin liittyvät ongelmat ovat kaikin tavoin triviaaleja, eikä satunnaiskävelykuvauksen kautta voida näissä tapauksissa löytää mitään uutta ja mielenkiintoista. Satunnaiskävelijöiden kautta rajapintojen käyttäytymistä voidaan kuitenkin tutkia tilanteissa, joissa monimutkaisempi tarkastelu ei onnistu. Monia mielenkiintoisia avoimia kysymyksiä liittyy esimerkiksi tilanteisiin, joissa on useita keskenään vuorovaikuttavia rajapintoja tai rajapintoihin vaikuttavia ulkoisia voimia. Voidaan esimerkiksi kysyä, kuinka KPZ-tyyppinen rajapinta käyttäytyy tilanteessa, jossa rajapinnan ohella järjestelmässä on kova, läpäisemätön seinä, ja rajapintaa ajetaan seinää kohti. KPZ-yhtälöstä lähtien tämä ongelma on varsin epätriviaali ja tiettävästi ratkaisematon, mutta samaa fysikaalista ongelmaa voidaan lähestyä helpompaa reittiä pitkin satunnaiskävelijöiden kautta. BCSOS-mallin tiedetään olevan KPZ-yhtälön universaalisuusluokassa, eli mallit ovat tietyllä tavalla keskenään samankaltaisia. Tästä lähtökohdasta onkin luontevaa kysyä, kuinka BCSOS-tyyppinen satunnaiskävelijä käyttäytyy heijastavan seinän vieressä, ja voidaanko tätä kautta luoda silmäys seinällä rajoitetun rajapinnan ilmiömaailmaan.

Heijastava seinä BCSOS-kävelijän tielle saadaan muuttamalla esimerkiksi tilan 0 siirtymätodennäköisyyksiä siten, että kävelijä siirtyy aina tilasta 0 askeleen ylöspäin. Nyt kun kävelijän lähtöpaikka asetetaan jonnekin nollatason yläpuolelle, kävelijä efektiivisesti näkee nollatasolla nollakantaman repulsion, joka työntää sitä ylöspäin. Kutsutaan tällä muutoksella BCSOS-kävelijästä saatua kävelijää *rajoitetuksi BCSOS-kävelijäksi*. Vaikka muutos aikaisempaan nähden vaikuttaa varsin pieneltä, seinän lisääminen mutkistaa kävelijän tarkastelua merkittävästi. Esimerkiksi vaikka kävelijän paikka on satunnaisprosessina edelleen markovinen, seinän vaikutuksesta sen askelprosessilla on äärettömän pitkä muisti, kuten myöhemmin nähdään.

Rajoitetun kävelijän tapauksessa mielenkiintoinen parametrialue on $p \in]1/2, 1]$, eli tapaus, jossa kävelijää ajetaan seinää kohti. Muussa tapauksessa kävelijä ajautuu seinän ulottumattomiin, ja siten kauan kuljettuaan vastaa kaikin tavoin tavalista, vapaata kävelijää. Kun $p > 1/2$, kävelijän ajautuminen seinää kohti ja seinän siihen kohdistama repulsio pitävät kävelijän seinän lähetyvillä. Erityisesti kävelijä on tällöin positiivisesti palaava, minkä osoittaminen onnistuu kätevästi lauseen 1 avulla näyttämällä, että kävelijällä on stationaarinen jakauma. Samalla saatua

stationaarista jakaumaa voidaan myös käyttää lauseen 2 kanssa paluuaikojen odotusarvojen määrittämiseen.

Globaalista tasapainoyhtälöstä (2.2) saadaan rajoitetun BCSOS-kävelijän stationaarille jakaumalle π yhtälöt

$$\begin{aligned}\pi(0) &= p\pi(1) \\ \pi(1) &= p\pi(2) + \pi(0) \\ \pi(i) &= p\pi(i+1) + (1-p)\pi(i-1) \quad \text{kaikille } i \geq 2.\end{aligned}$$

Yhtälöistä nähdään helposti, että triviaalitapauksessa $p = 0$ normitusehdon toteuttavaa stationaarista jakaumaa ei ole. Tämä on ilmeistä, sillä tässä tapauksessa kävelijä etenee suoraviivaisesti seinästä pois päin äärettömyyksiin. Vastaavasti toisessa triviaalitapauksessa $p = 1$ kävelijä vuorottelee tilojen 0 ja 1 välillä, ja edellisten yhtälöiden nojalla stationaarille jakaumalle tässä tapauksessa pätee $\pi(0) = 1/2 = \pi(1)$. Kun $p > 0$, globaalista tasapainoyhtälöstä saadaan 2. kertaluvun rekursioyhtälö, joka alkuehtoineen on

$$\begin{aligned}\pi(1) &= \frac{1}{p}\pi(0) \\ \pi(2) &= \frac{1-p}{p^2}\pi(0) \\ \pi(i+1) &= \frac{1}{p}\pi(i) + \frac{p-1}{p}\pi(i-1) \quad \text{kaikille } i \geq 2,\end{aligned} \tag{3.1}$$

missä $\pi(0)$ ratkeaa normituksesta. Kun $i \geq 2$, kirjoitetaan $\pi(i)$ teleskooppisummana ja käytetään edellistä rekursioyhtälöä sarjan termeihin. Näin saadaan

$$\begin{aligned}\pi(i) &= \pi(1) + \sum_{j=2}^i [\pi(j) - \pi(j-1)] \stackrel{(3.1)}{=} \pi(1) + p \sum_{j=2}^i [\pi(j+1) - \pi(j-1)] \\ &= \pi(1) + p(\pi(i+1) + \pi(i) - \pi(1) - \pi(2)) = p\pi(i+1) + p\pi(i),\end{aligned}$$

eli $\pi(i+1) = \frac{1-p}{p}\pi(i)$ kun $i \geq 2$. Iteroimalla tätä yhtälöä ja sijoittamalla alkuehdot $\pi(1)$:lle ja $\pi(2)$:lle saadaan

$$\pi(i) = \frac{\pi(0)}{1-p} \left(\frac{1-p}{p} \right)^i \quad \text{kun } i \geq 1.$$

Jakauma täytyy kuitenkin vielä normittaa. Normitusehdosta saadaan

$$1 = \sum_{i=0}^{\infty} \pi(i) = \pi(0) \left(1 + \frac{1}{p} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{1-p}{p} \right)^i \right),$$

joten jotta jakauma normittuisi, edellä olevan geometrisen sarjan on supettava, eli on oltava $p > 1/2$. Näin ollen stationaarinen jakauma on olemassa vain kun

$p > 1/2$, ja siten vain tällöin kävelijä on positiivisesti palaava. Kun $p > 1/2$, normituksesta saadaan

$$1 = \pi(0) \left(1 + \frac{1}{p} \cdot \frac{1}{1 - \frac{1-p}{p}} \right) = \pi(0) \cdot \frac{2p}{2p-1},$$

eli $\pi(0) = 1 - \frac{1}{2p}$. Kun $p > 1/2$, rajoitetulla BCSOS-kävelijällä on siis stationaarinen jakauma

$$\pi(i) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2p}, & \text{kun } i = 0 \\ \frac{2p-1}{2p^2} \left(\frac{1-p}{p} \right)^{i-1}, & \text{kun } i \geq 1. \end{cases} \quad (3.2)$$

Erityisesti stationaarisesta jakaumasta voidaan johtaa helposti kävelijän keskimääräinen paluuaika nollatilaan, eli keskimääräinen aika seinään törmäämisten välillä. Tämä on lauseen 2 nojalla

$$\mathbb{E}(T_0) = \pi(0)^{-1} = \frac{2p}{2p-1}. \quad (3.3)$$

3.5 TwinBCSOS-malli

Luonnollinen seuraava askel edellisen kappaleen rajapinnan ja seinän mallista on päästää myös seinä liikkumaan, eli tarkastella kahden risteämättömän rajapinnan ongelmaa. Myös tämän ongelman käsittely esimerkiksi KPZ-yhtälöstä käsin on äärimmäisen vaikeaa, sillä risteämättömyysehto kytkee rajapinnat toisiinsa varsin monimutkaisella tavalla. Tämänkaltainen tilanne on kuitenkin fysikaalisesti varsin mielenkiintoinen, sillä faasien rajat esiintyvät monissa tilanteissa vain tietyssä järjestyksessä. Esimerkki tällaisesta oleellisesti kaksiulotteisesta järjestelmästä on paperi, joka sytytetään alareunastaan palamaan. Eri faasit tässä tapauksessa ovat palamaton paperi, palava paperi sekä jo palanut paperi, ja faasit esiintyvät ylhäältä lukien aina tässä järjestyksessä, eli faasirajat eivät voi ohittaa toisiaan.

Myös tässä tapauksessa ongelmaa lähestytään satunnaiskävelijöiden kautta kuvaamalla rajapintoja BCSOS-tyyppisillä satunnaiskävelijöillä $\{X_n\}$ ja $\{Y_n\}$, joista $\{Y_n\}$ kuvatkoon "ylempää" kävelijää. Jotta kävelijät pysyisivät toistensa vaikutuspiirissä, kävelijät asetetaan ajautumaan toisiaan kohti. Yksinkertaisuuden vuoksi tämä ajo lisäksi asetetaan symmetriseksi, eli koko järjestelmää kuvaa edelleen vain yksi parametri $p \in [0, 1]$, joka on se todennäköisyys, jolla kävelijä ottaa askeleen kumppaniaan kohti. Kävelijöiden keskinäisen samanarvoisuuden vuoksi kutsutaan tätä mallia jatkossa nimellä *TwinBCSOS-malli*.

TwinBCSOS-mallin kävelijät käyttäytyvät tavallisten BCSOS-kävelijöiden tapaan ollessaan kaukana toisistaan, mutta kävelijöiden kohdatessa niiden välillä

vaikuttaa ehdoton ohituskielto. Tämän kiellon seurauksena kävelijöiden käyttäytyminen muuttuu hyvin oleellisella tavalla, sillä esimerkiksi vaikka koko järjestelmää kuvaava prosessi $\{Z_n\}$, missä $Z_n = (X_n, Y_n)$, on edelleen markovinen, yksittäisiä kävelijöitä kuvaavat prosessit saavat ohituskiellon luoman kytkennän vuoksi äärettömän pitkän muistin. Samoin käy myös kävelijöiden askelprosesseille, jotka ilman ohituskieltoa olivat täysin muistittomia.

Kävelijöiden välinen ohituskielto voidaan toteuttaa useammalla eri tavalla, joista tässä esitellään kaksi yksinkertaisinta. Jossain mielessä luonnollisin tapa kieltää kävelijöitä ohittamasta toisiaan on yksinkertaisesti lisätä siirtymätodennäköisyyksiin ohituksen kieltävä ehto $X_{n+1} \leq Y_{n+1}$. Kutsutaan tämänkaltaisella ehdolla järjestettyä ohituskieltoa jatkossa *fermioniseksi* ohituskielloksi, viitaten ilmeiseen fysikaaliseen analogiaan. Fermionisessa tapauksessa kävelijöiden ollessa vierekkäin siirtymätodennäköisyydet muuttuvat siten, että askeleen, jossa kävelijät kulkevat toisiaan kohti, todennäköisyys on nolla. Tällöin myös muiden askelten todennäköisyydet muuttuvat siten, että suurilla p fermioniset kävelijät jatkavat kohtaamistilanteesta mieluiten samaan suuntaan.

Toinen tapa toteuttaa ohituskielto on vaihtaa kävelijöiden identiteetti mikäli ne ohittavat toisensa, eli pitää $\{X_n\}$ ja $\{Y_n\}$ vapaina kävelijöinä, mutta tarkastella kävelijöinä prosesseja $\{X'_n\}$ ja $\{Y'_n\}$, missä $X'_n = \min\{X_n, Y_n\}$ ja $Y'_n = \max\{X_n, Y_n\}$. Kutsutaan näin järjestettyä ohituskieltoa puolestaan *bosoniseksi* ohituskielloksi. Toinen tapa mieltää bosoninen ohituskielto on, että törmätessään toisiinsa kävelijät "kimpoavat" takaisin tulosuuntaansa. Fermioninen ja bosoninen ohituskielto johtavat erilaisiin siirtymätodennäköisyyksiin kävelijöiden ollessa vierekkäin, ja myöhemmin osoittautuu, että tällä eroavaisuudella on varsin kauaskantoisia seurauksia. Esimerkiksi suurilla p bosoniset kävelijät törmäävät ja kimpoavat takaisin lähes joka askeleella, jolloin kävelijät pysyvät pitkällä aikavälillä lähes paikoillaan.

Risteämättömiin satunnaiskävelijöihin törmää myös monenlaisissa muissa sovelluksissa, ja ongelma on itsessään varsin vanha ja paljon tutkittu [15, 16]. Rajapintoja suoraviivaisempana fysikaalisena sovelluksena risteämättömille satunnaiskävelyille on ohitukseen kykenemättömien hiukkasten diffuusio (*single-file diffusion*), joka on edelleen aktiivisen tutkimuksen kohteena [17–19]. Koska kävelijöille asetettu risteämättömyysehto vastaa monin tavoin fermionien Paulin kieltoääntöä, joitain eksakteja tuloksia risteämättömien kävelijöiden malleille on myös laskettu suoraan monen hiukkasen kvanttimekaniikan avulla [20]. Risteämättömille poluille on myös olemassa puhtaasti kombinatorisia tuloksia, joista puhutaan tarkemmin kappaleessa 5.1. Näitä tuloksia, kuten myöskään muita risteämättömille kävelyille muissa tutkimuksissa saatuja tuloksia, ei kuitenkaan voida suoraan soveltaa TwinBCSOS-malliin. Toisin kuin kombinatorisissa tarkasteluissa, TwinBCSOS-mallissa siirtymätodennäköisyydet muuttuvat polkujen kohdatessa, ja siten risteämättömien polkujen suora laskeminen ei auta mikäli samalla ei voida laskea polkujen kohtaamisten lukumäärää. Lisäksi TwinBCSOS-mallissa oleellisessa asemassa on kävelijöiden diffuusion biasointi siten, että kävelijät ajautuvat toisiaan kohti. Useimmat aikaisemmat tutkimukset tarkastele-

vat biasoimatonta tapausta, ja lisäksi usein yleisessä N :n hiukkasen tilanteessa, missä N oletetaan suureksi.

TwinBCSOS-mallin kävelijöiden yhteydessä ei ole mielekästä tarkastella palaavuutta, sillä vaikka kävelijät pysyvät toistensa lähetyvillä, ne voivat yhdessä vaeltaa kuinka kauas alkupaikoistaan tahansa. Kävelijöiden välisen etäisyyden kohdalla palaavuus sen sijaan on mielekäs käsite, ja kävelijöiden väliselle etäisyydelle voidaan myös laskea stationaarinen jakauma. Eräs BCSOS-ehdon mukanaan tuoma huomionarvoinen seikka on, että TwinBCSOS-mallissa kävelijöiden välisen etäisyyden pariteetti säilyy, eli jos alkutilassa $Y_n - X_n$ on parillinen, on se sitä aina. Koska etäisyyden pariteetti säilyy, ja koska ohituskiellon kannalta tapaukset $Y_n - X_n = 0$ ja $Y_n - X_n = 1$ ovat siirtymätodennäköisyyksiltään samat, voidaan molemman pariteetin tapaukset käsitellä samanaikaisesti tarkastelemalla suuretta $D_n = \lfloor \frac{1}{2}(Y_n - X_n) \rfloor$. Tämä suure käyttäytyy nyt ikään kuin rajoitettu RSOS-kävelijä, jonka stationaarista jakaumaa tarkastelemalla voidaan johtaa esimerkiksi lauseke keskimääräiselle ajalle TwinBCSOS-mallin kävelijöiden kohtaamisten välillä.

Stationaarisen jakauman johtaminen suurelle D_n esimerkiksi fermionisessa TwinBCSOS-mallissa käy samoin kuin aiemmin tarkastellulle rajoitetulle BCSOS-kävelijälle. Globaali tasapainoyhtälö (2.2) antaa stationaariselle jakaumalle $\pi(i)$ yhtälöt

$$\begin{aligned} \frac{1-p}{1+p}\pi(0) &= p^2\pi(1) \\ \left((1-p)^2 + p^2\right)\pi(1) &= \frac{1-p}{1+p}\pi(0) + p^2\pi(2) \\ \left((1-p)^2 + p^2\right)\pi(i) &= (1-p)^2\pi(i-1) + p^2\pi(i+1) \quad \text{kaikille } i \geq 2. \end{aligned}$$

Nämä yhtälöt saadaan muutamalla välivaiheella muotoon

$$\begin{aligned} \pi(1) &= ab\pi(0) \\ \pi(2) &= a^2b\pi(0) \\ \pi(i) &= (a+1)\pi(i-1) - a\pi(i-2) \quad \text{kun } i \geq 3, \end{aligned} \tag{3.4}$$

missä $a := p^{-2}(1-p)^2$ ja $b := (1-p^2)^{-1}$. Kirjoittamalla taas $\pi(i)$ teleskooppi-summana kun $i \geq 3$, saadaan edellistä rekursioyhtälöä käyttämällä

$$\begin{aligned} \pi(i) &= \pi(2) + \sum_{j=3}^i \pi(j) - \pi(j-1) \stackrel{(3.4)}{=} \pi(2) + a \sum_{j=3}^i \pi(j-1) - \pi(j-2) = \\ &= \pi(2) + a(\pi(i-1) - \pi(1)) = a\pi(i-1), \end{aligned}$$

josta

$$\pi(i) = a^{i-2}\pi(2) = a^i b \pi(0) \quad \text{kun } i \geq 3.$$

Aikaisempien tietojen perusteella tämä yhtälö pätee myös kun $i = 1$ tai $i = 2$. Normituksesta saadaan aikaisemman tavoin luonnollinen ehto $p > 1/2$ stationaarisen jakauman olemassaololle, ja tämän lisäksi ehto

$$\pi(0) = \left(1 + \frac{ab}{1-a}\right)^{-1} = 1 - \frac{1-p}{2p^2}.$$

Lopullinen stationaarinen jakauma kävelijöiden etäisyydelle – tai tarkemmin sanottuna suurelle D_n – fermionisessa TwinBCSOS-mallissa on siis

$$\pi(i) = \begin{cases} 1 - \frac{1-p}{2p^2} & \text{kun } i = 0 \\ \frac{2p-1}{2p^2(1-p)} \left(\frac{1-p}{p}\right)^{2i} & \text{kun } i \geq 1. \end{cases} \quad (3.5)$$

Lauseen 2 avulla tästä saadaan jälleen suoraan etäisyyden nollaanpaluuajan odotusarvo eli keskimääräinen aika kävelijöiden kohtaamisten välillä. Lauseen 2 nojalla tämä on

$$\mathbb{E}(T_0) = \pi(0)^{-1} = \frac{2p^2}{(2p-1)(1+p)}. \quad (3.6)$$

3.6 Rajapintojen ja satunnaiskävelyn leveys

Rajapinnan *leveys* on keskeisimpiä rajapintojen kasvuun liittyviä suureita. Rajapinnan keskimääräinen korkeus on tyypillisesti helppo ratkaista, ja sen aikakehitys on yleensä suoraviivaista etenemistä. Rajapinnan korkeuden *neliöpoikkeama* sen sijaan on huomattavasti mielenkiintoisempi suure. Rajapinnan korkeuden neliöpoikkeama kuvaa sitä, kuinka paljon rajapinnan paikka vaihtelee keskimääräisen asemansa ympärillä, eli se kuvaa suuressa skaalassa rajapinnan leveyttä rajapintaa vastaan kohtisuorassa suunnassa. Lisäksi neliöpoikkeama karakterisoi myös rajapinnan karheutta, mikä puolestaan on usein käytännön sovellusten tapauksessa oleellinen esimerkiksi rajapinnan kemialliseen käyttäytymiseen vaikuttava tekijä.

Rajapinnan korkeuden ollessa satunnaismuuttuja, luonnollinen mittari sen neliöpoikkeamalle on korkeuden varianssi. Rajapintamallien tapauksessa rajapinnan korkeuden globaali varianssi on kuitenkin tyypillisesti ääretön tai yksinkertaisesti määrittelemätön, joten on tarpeen tarkastella neliöpoikkeamaa tietyn kokoisessa rajapinnan pätkässä. Satunnaiskävelykuvassa tämä tarkoittaa sitä, että kävelijän paikan varianssi lasketaan vain jostain L :n peräkkäisen ajanhetken otoksesta, ja näin saatu otosvariassi keskiarvoistetaan kaikkien L :n mittaisten kävelijän polkujen yli. Näin siis tulee määritellyksi satunnaiskävelyn $\{X_n\}$ leveys

$$W^2 := \left\langle \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{L-1} (X_n - \bar{X}_L)^2 \right\rangle_L, \quad (3.7)$$

missä

$$\bar{X}_L = \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{L-1} X_n$$

on kävelijän keskimääräinen paikka *samassa* L :n mittaisessa otoksessa ja $\langle \cdot \rangle_L$ kuvaa keskiarvoistusta kaikkien L :n mittaisten polkujen yli. On syytä huomata, että näin määriteltynä leveys on sekä kävelijän parametrien että otospituuden L funktio.

3.7 Satunnaiskävelijöiden autokorrelaatiot

Leveyden määritelmä (3.7) on sellaisenaan monimutkainen ja hankala lähtökohta teoreettisille tarkasteluille. Kappaleessa 5.2 leveyden lauseke (3.7) puretaan osiin, jolloin paljastuu, että satunnaiskävelyn leveys voidaan elegantilla tavalla määrittää kävelyn *autokorrelaatioista*. Korrelaatiot ovat leveyteen verrattuna huomattavasti syvällisempi rajapintojen ominaisuus, ja niiden käsittely on teoreettisesti suoraviivaisempaa. Lisäksi osoittautuu, että korrelaatioiden kautta leveyden määrittämiseen saadaan aivan uusi työkalu, sillä korrelaatioita voidaan tavanomaisen numeerisen Monte Carlo -simuloinnin lisäksi määrittää myös symbolisesti.

Jatkon kannalta keskeiseksi suureeksi osoittautuu tällöin kävelijän eri ajanhetkinä ottamien askelten Δ_i ja Δ_j välinen korrelaatiotermi $\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_j)$. Koska kävelijöitä tarkastellaan stationarisessa tilassa, eli vasta kun kävelijä on kaikin tavoin "unoh-tanut" lähtöpaikkansa, esimerkiksi kävelijän paikka tietyllä hetkellä tai tietyllä hetkellä otettu askel eivät tilastollisilta ominaisuuksiltaan eksplisiittisesti riipu tarkasteluhetkestä. Erityisesti korrelaatiotermi $\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_j)$ on siten vain hetkien i ja j välisen aikaeron funktio, eli $\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_j) = \phi(|j - i|)$. Funktiota ϕ kutsutaan jatkossa *korrelaatiotoksi* tai yksinkertaisesti *askelkorrelaattoriksi*.

4 Numeeriset menetelmät

4.1 Satunnaiskävelyn Monte Carlo -simulointi

Luonnollinen tapa tutkia satunnaismuuttujien odotusarvoina määriteltyjä suureita kuten leveyttä tai askelkorrelaattoria on käyttää Monte Carlo -simulointia. Monte Carlo -menetelmässä (MC) deterministinen, kaikkien vaihtoehtojen läpikäynti korvataan satunnaisella otannalla. Kun otanta tehdään ottaen huomioon eri tapausten erilaiset todennäköisyydet, odotusarvolle saadaan hyvä arvio kaikkien vaihtoehtojen lukumäärään nähden varsin pienellä otannalla. Esimerkiksi otospituudella $L = 65536$ leveyden laskeminen keskiarvoistamalla jokaisen erilaisen polun yli vaatisi noin 10^{19728} polun leveyksien laskemista, mikä on laskennallisesti mahdotonta. Kuitenkin jo noin 10^5 polun satunnainen otanta antaa erittäin tarkan arvion leveydestä suurellakin otospituudella, kunhan satunnainen otanta tehdään ottaen huomioon polkujen erilaiset esiintymistodennäköisyydet.

Tässä työssä MC-simulointia käytettiin rajoitetun BCSOS-kävelijän sekä TwinBCSOS-mallin leveyden ja askelkorrelaattorin arvioimiseen. Molemmissa tapauksissa satunnaiskävelijän polkua generoitiin arpomalla askel kerrallaan satunnaislukugeneraattorin avulla. Tehokkuussyistä koko polkua ei kummassakaan tapauksessa tallennettu muistiin, vaan leveyttä laskiessa vain kävelijän hetkelliset paikat ja paikkojen neliöt summattiin muistiin otosvarianssin laskemiseksi. Askelkorrelaattoria arvioitaessa edelliset askeleet säilöttiin rengaspuskuriin aina k askelta menneisyyteen asti, ja jokaisen askeleen kohdalla laskettiin tulo $\Delta_i \Delta_{i-j}$ kaikille $j = 0, 1, \dots, k$. Näitä tuloja summaamalla ja lopuksi jakamalla otoksien määrällä voitiin arvioida askelkorrelaattori $\phi(d)$ kaikille $d = 0, 1, \dots, k$. Simulaatio-ohjelmat kirjoitettiin C-kielillä käyttäen satunnaislukugeneraattorina *GNU Scientific Library* -kirjaston nopeaa *Mersenne Twister* -toteutusta `gs1_rng_mt19937`. Käsin optimoitu C-kielinen toteutus mahdollisti suurten otospituuksien ja otosmäärien käyttämisen ilman kohtuuttoman pitkiä ajoaikoja.

Leveyden tapauksessa MC-simulointi osoittautui erittäin hyväksi tavaksi saada tarkkoja arvioita leveyden arvoista eri parametreilla ja otospituuksilla. Suurin käytetty otospituus oli $L = 65536$, jolla jatkumokäyttäytyminen oli jo selvästi nähtävissä, ja esimerkiksi erilaisten rajan $L \rightarrow \infty$ skaalausominaisuuksien määrittäminen onnistui hyvällä tarkkuudella. Kullakin kävelijän parametrin arvolla leveys arvioitiin $2^{17} \approx 131 \cdot 10^3$ riippumattoman polun otoksesta, mikä osoittautui hyväksi kompromissiksi tulosten tarkkuuden ja ajoajan välillä. Askelkorrelaattorin Monte Carlo -simulaatioiden kohdalla tapaukset, joissa askelten väliset korrelaatiot ovat hyvin heikkoja, osoittautuivat ongelmallisiksi. Esimerkiksi kun TwinBCSOS-mallin ajoparametri p on likimain $1/2$ tai 1 , kävelijän askeleet ovat lähes riippumattomia, jolloin MC-simulaatiolla laskettaessa korrelaattorin todellinen arvo hukkuu osittain MC-menetelmän epätarkkuudesta syntyvään kohinaan. Tämä esti esimerkiksi korrelaattorien eksaktien lausekkeiden etsimisen tarkastelemalla peräkkäisten korrelaattorien osamääriä. MC-menetelmän

käytöstä aiheutuva kohina pienenee otosten määrää kasvattaessa, mutta heikon korrelaation rajan tutkiminen tarpeeksi tarkasti MC-simulaation keinoin olisi käynyt käytettävissä olevan laskentatehon (2400 MHz *AMD Opteron 880*) rajoissa liian vaativaksi. Koska juuri heikon korrelaation rajan tapaukset ovat mielenkiintoisimpia, korrelaattorien laskemiseen kehitettiin myös toinen tapa symbolisen laskennan avulla.

4.2 Korrelaattorien symbolinen laskenta

Koska askelkorrelaatiofunktioiden määrittäminen heikon korrelaation rajalla ei Monte Carlo -menetelmällä onnistunut riittävän tarkasti, korrelaatioita tutkittiin myös laskemalla askelkorrelaatiofunktioita analyttisesti. Tämä onnistuu suoraan käymällä läpi kävelijän kaikki tietyt mittaiset polut, kunhan lasku ensin palautetaan äärelliseksi pienellä tempulla. Avainhuomiona tässä on se, että askelten välisen korrelaation antava odotusarvo $\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_{i+d})$ voidaan ehdollistaa kävelijän paikalla hetkellä i . Kun näin tehdään, korrelaattoritermin laskemiseksi kiinteällä d riittää käsitellä vain äärellisen monta polkua, sillä kun esimerkiksi rajoitettu BCSOS-kävelijä on hetkellä i tarpeeksi kaukana seinästä, ei se hetkeen $i + d$ mennessä pääse seinän lähelle, ja siten käyttäytyy kuten vapaa BCSOS-kävelijä. TwinBCSOS-mallissa korrelaatiotermi voidaan ehdollistaa kävelijöiden etäisyydellä hetkellä i , sillä taas jos kävelijät ovat hetkellä i tarpeeksi kaukana toisistaan, käyttäytyvät ne hetkeen $i + d$ asti kuten vapaat kävelijät.

Edellä kuvatulla menetelmällä esimerkiksi rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorifunktion $\theta(d, p)$ lausekkeelle kiinteällä d saadaan muoto, jossa riittää lopulta tuntea vapaan kävelijän korrelaattori $\theta_0(p)$, kävelijän paikan stationaarinen jakauma sekä äärellinen määrä erilaisten polkujen todennäköisyyksiä. Ehdollistamalla korrelaattoritermi kävelijän paikalla hetkellä i eli satunnaismuuttujalla X_i

$$\begin{aligned} \theta(d, p) - \theta_0(p) &= \mathbb{E}(\Delta_i \Delta_{i+d}) - \theta_0(p) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_{i+d} | X_i = x) - \theta_0(p)) = \\ &= \sum_{x=0}^{\infty} \mathbb{P}(X_i = x) (\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_{i+d} | X_i = x) - \theta_0(p)). \end{aligned}$$

Kun kävelijän historialle ennen hetkeä i ei ole asetettu mitään ehtoja, lausekkeessa oleva paikan jakauma $\mathbb{P}(X_i = x)$ ei ole mitään muuta kuin paikan stationaarinen jakauma $\pi(x) = \pi(x, p)$, jonka lauseke rajoitetulle BCSOS-kävelijälle johdettiin kappaleessa 3.4 ja TwinBCSOS-mallille kappaleessa 3.5. Lisäksi kun $X_i > d$, kävelijä ei ehdi hetkeen $i + d$ mennessä seinän vaikutuspiiriin, ja siten sen askelkorrelaattori on täsmälleen vapaan kävelijän korrelaattori $\theta_0(p) = 2p - 1$. Näin ollen edellä oleva summa katkeaa kohdasta $x = d$, ja siten

$$\theta(d, p) - \theta_0(p) = \sum_{x=0}^d \pi(x, p) (\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_{i+d} | X_i = x) - \theta_0).$$

Edelleen, koska kävelijän askeleet Δ_j ovat aina ± 1 , $\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_j) = 2\mathbb{P}(\Delta_i \Delta_j = 1) - 1$, ja siten

$$\theta(d, p) = \theta_0(p) + \sum_{x=0}^d \pi(x, p) (2\mathbb{P}(\Delta_i \Delta_{i+d} = 1 \mid X_i = x) - 1 - \theta_0(p)). \quad (4.1)$$

Rajoitetun BCSOS-kävelyn askelkorrelaattorin laskemiseksi etäisyydellä d riittää siis käydä läpi kaikki eri $d + 1$ askeleen polut eri aloituskorkeuksilla ja laskea niiden todennäköisyydet. Koska käsiteltävien polkukonfiguraatioiden lukumäärä on $(d + 1)2^{d+1}$, todennäköisyyksien laskeminen käsin käy pian liian työlääksi. TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattorin tapauksessa käsiteltävien polkukonfiguraatioiden määrä kasvaa vielä merkittävästi nopeammin, sillä molempien kävelijöiden polut tulee ottaa huomioon. Lausekkeen (4.1) laskemisessa kannattaa siis turvautua tietokoneeseen ja symboliseen laskentaan.

Summauksen (4.1) suorittamiseen luotiin tätä työtä varten kaksi ohjelmaa. Ensimmäinen oli Python-kielellä ja *sympy*-kirjastolla toteutettu *corriseva*, jolla korrelaatiofunktiot saatiin laskettua muutamalle ensimmäiselle d . Laskennan nopeuttamiseksi *corriseva* korvattiin C++-kielisellä ohjelmalla *corruptor*, joka käytti symboliseen laskentaan *GiNaC*-kirjastoa. Riittävien optimointien jälkeen tällä ohjelmalla rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattori voitiin määrittää kohtuullisessa ajassa etäisyydelle $d = 25$ asti ja TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattori puolestaan etäisyyteen $d = 13$ saakka.

Kun symbolisella laskennalla löydetyistä korrelaattorien lausekkeista etsittiin systematiikkaa ja mahdollisia rekursioita, hyödylliseksi menetelmäksi osoittautui korrelaattorien nollakohtien piirtäminen kompleksitasoon. Eri d :n arvoilla saaduista nollakohdista piirretystä kuvasarjasta pystyttiin etsimään esimerkiksi systemaattisesti käyttäytyviä tekijöitä tutkimalla nollakohtien paikkojen kehittymistä d :n kasvaessa.

5 Tulokset

5.1 Binääripolkujen kombinatoriikkaa

Yksi tapa lähestyä diskreetteihin satunnaiskävelijöihin liittyviä ongelmia on puhdas kombinatoriikka [21, 22]. Kävelijöiden diskreettisuuden ansiosta joitain tuloksia voidaan ratkaista laskemalla eksplisiittisesti kaikki tietyn ehdon toteuttavat kävelijän polut. Kaikilla BCSOS-tyyppisillä kävelijöillä on kullakin hetkellä valittavanaan vain kaksi erilaista askelta – yksikön mittainen askel alas tai ylös. Kutsutaan tällaisia ylös- ja alas-askelista koostuvia polkuja jatkossa *binääripoluiksi*. Erilaisia $n:n$ askeleen binääripolkuja on triviaalisti 2^n kappaletta, mutta polkujen laskeminen mutkistuu oleellisesti kun poluille asetetaan jokin rajoite. Esimerkiksi rajoitetun BCSOS-kävelijän tapauksessa polut eivät saa leikata nollatasoa. Yksi tällaisiin rajoitettuihin binääripolkuihin liittyvä kombinatorinen ongelma on laskea ne polut, joiden lähtö- ja päätepisteet ovat nollatasolla, ja jotka eivät missään vaiheessa käy nollatason alapuolella. Tällaisella rajoituksella varustettuja polkuja kutsutaan kirjallisuudessa joskus *Dyckin poluiksi* [22], sillä niillä on läheinen yhteys Dyckin kielenä tunnettuun algebralliseen kieleen. Laskemalla tällaiset polut voidaan esimerkiksi ratkaista rajoitetun BCSOS-kävelijän *kuplakokojakauma*, eli kävelijän seinän vierestä takaisin kulkevien ekskursioiden pituusjakauma. Tässä tutkimuksessa rajoitetun BCSOS-kävelijän kuplakokojakaumaan päädyttiin alun perin tuntematta yhteyttä Dyckin polkuihin ja tunnettuihin kombinatorisiin tuloksiin. Jatkossa esitellään kuitenkin suoraviivaisempi ja kirjallisuudessa laajalti tunnettu tapa laskea nollatasolta nollatasolle kulkevat rajoitetut polut.

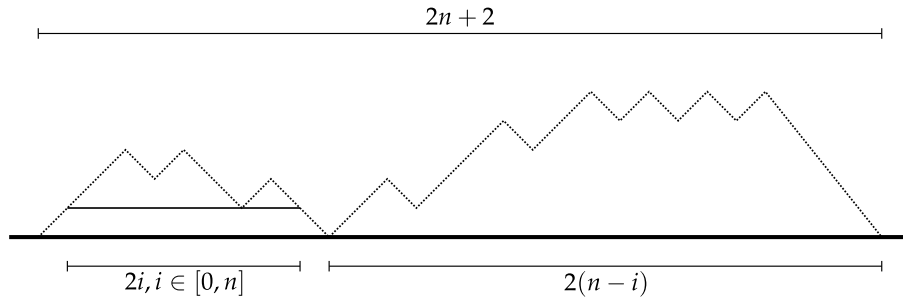
Koska nollatasolta nollatasolle kulkevassa ekskursiossa polkujen lähtö- ja päätepisteet ovat samalla tasolla, on poluissa oltava sama määrä ylös-askelia kuin alas-askelia. Erityisesti siis poluissa on oltava parillinen määrä askelia. Merkitään C_n :llä $2n$ askeleen ekskursioiden lukumäärää. Suoraviivaisin tapa antaa suljetussa muodossa oleva lauseke luvuille C_n on johtaa niiden välille rekursio ja ratkaista se. Rajoitettujen polkujen tapauksessa ilmeisin rekursio saadaan jakamalla polku kahteen osaan ensimmäisen nollatasolle palaamisen kohdalta. Näin saatava rekursio on selitetty tarkemmin kuvassa 2. Tuloksena saadaan

$$C_{n+1} = \sum_{i=0}^n C_i C_{n-i}, \quad (5.1)$$

missä $n \geq 0$. Tyhjiä eli nollan askeleen polkuja on vain yksi, eli rekursion alkuehtona on $C_0 = 1$.

Rekursioyhtälö (5.1) voidaan helposti ratkaista käyttämällä generoivia funktioita. Merkitään lukujonon (C_n) generoivaa funktiota

$$G(z) := \sum_{n=0}^{\infty} C_n z^n.$$



Kuva 2. Lukujonon (C_n) ratkaisuun johtava rajoitettujen binääripolkujen rekursio. Ensimmäinen ekskursio nollassa takaisin alkaa ylös-askeleella ja päättyy alas-askeleeseen, ja tässä välissä polku kulkee – mahdollisesti nollan askeleen matkan – ykköstason yläpuolella. Ensimmäisen ekskursion jälkeen ollaan jälleen tilanteessa, jossa kävelijä lähtee nollassa liikkeelle ja päättyy nollassa. Näin ollen kun $n \geq 0$, kukin $2n + 2$ askeleen matka voidaan jakaa yksikäsitteisesti osiin, jotka ovat aloittava askel ylös, $2i$ askeleen ekskursio ykköstason yläpuolella, nollassa palauttava alas-askel sekä $2(n - i)$ askeleen ekskursio nollassa nollassa, missä $i \in \{0, 1, \dots, n\}$. Erilaisia $2i$ askeleen ekskursioita ykköstason yläpuolella on C_i kappaletta ja vastaavasti $2(n - i)$ askeleen ekskursioita C_{n-i} kappaletta. Summaamalla yli i :n saadaan kaikki $2n + 2$ ekskursiot laskettua, eli $C_{n+1} = \sum_{i=0}^n C_i C_{n-i}$.

Tämä sarja suppenee jossain kompleksitason origokeskisessä kiekossa, sillä koska $C_n \leq 4^n$, generoivaa funktiota G voidaan arvioida ylöspäin sarjalla $\sum_{n=0}^{\infty} 4^n z^n$, jonka suppenemissäde on $1/4$. Laskemalla G :n neliö käyttämällä Cauchyn tuloa päästään suoraan käyttämään rekursiota (5.1), sillä

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} C_n z^n \right)^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{i=0}^n C_i z^i C_{n-i} z^{n-i} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\left(\sum_{i=0}^n C_i C_{n-i} \right)}_{C_{n+1}} z^n,$$

eli kertomalla molemmat puolet z :lla

$$zG(z)^2 = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1} z^{n+1} = G(z) - 1,$$

josta

$$G(z) = \frac{1 - \sqrt{1 - 4z}}{2z}, \tag{5.2}$$

sillä toinen saadun toisen asteen yhtälön ratkaisuista divergoi origossa.

Kertoimien C_n ratkaisemiseksi riittää nyt kehittää saatu G sarjaksi origon

ympärillä. Suoraan yleistetyn binomilauseen nojalla

$$\begin{aligned}\sqrt{1-4z} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-4z)^k}{k!} \prod_{n=0}^{k-1} \left(\frac{1}{2} - n\right) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2z)^k}{k!} \prod_{n=0}^{k-1} (2n-1) = \\ &= 1 - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2z)^k}{k!} \underbrace{(2k-3)!!}_{\frac{(2k-2)!}{2^{k-1}(k-1)!}} = 1 - 2 \sum_{n=0}^{\infty} \binom{2n}{n} \frac{z^{n+1}}{n+1},\end{aligned}$$

josta $G(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{2n}{n} \frac{z^n}{n+1}$, eli generoivan funktion sarjaesityksen yksikäsitteisyyden nojalla

$$C_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n}. \quad (5.3)$$

Luvut $(C_n)_{n=0}^{\infty} = 1, 1, 2, 5, 14, 42, 132, 429, 1430, \dots$ tunnetaan *Catalanin lukuina*³, ja ne esiintyvät myös lukemattomissa muissa kombinatoriikan sovelluksissa [22, 23]. Stirlingin kaavaa käyttämällä saadaan Catalanin lukujen asymptoottiseksi käyttäytymiseksi suurilla n

$$C_n \sim \frac{4^n}{\sqrt{\pi} \cdot n^{3/2}},$$

eli polun pituuden L kasvaessa nollatasolta nollatasolle kulkevien rajoitettujen polkujen lukumäärä suhteessa kaikkien polkujen lukumäärään vähenee kuten $\sim L^{-3/2}$.

Nollatasolta nollatasolle palaavien ekskursioiden lukumäärästä C_n voidaan suoraan ratkaista esimerkiksi aikaisemmin mainittu rajoitetun BCSOS-kävelijän kuplakokojakauma, eli tietyn mittaisten ekskursioiden todennäköisyysjakauma. Kuplakokojakauman tapauksessa ekskursioiden katsotaan tyypillisesti päättyvän ensimmäiseen paluuseen nollatasolle. Tällaisten $2n$ askeleen ekskursioiden lukumäärä on C_{n-1} , sillä ekskursioiden voidaan katsoa koostuvan askeleesta ylös, $2n-2$ askeleen ekskursiosta ykköstason yläpuolella sekä viimeisestä askeleesta alas. Koska ensimmäinen askel on ylöspäin todennäköisyydellä 1, jokaisen $2n$ askeleen ekskursioiden todennäköisyys on $p^n(1-p)^{n-1}$. Kertomalla tämä ekskursioiden lukumäärällä saadaan lopullinen kuplakokojakauma, joka tulosta (5.3) käyttämällä on

$$\mathbb{P}(\beta = 2n) = \frac{1}{n} \binom{2n-2}{n-1} p^n (1-p)^{n-1},$$

missä β on ekskursioiden eli "kuplan" pituus.

Catalanin luvut (C_n) antavat niiden nollatasolta lähtevien rajoitettujen binääripolkujen lukumäärän, joissa on n askelta ylös ja n askelta alas. Polkujen

³Eugène Charles Catalan (1814–1894), belgialainen matemaatikko.

laskeminen mutkistuu hieman, kun sallitaan polun päätyminen muualle kuin takaisin nollassa, eli kun halutaan laskea nollassa lähtevät rajoitetut polut, joissa on n askelta ylös ja k askelta alas. Merkitään tällaisten polkujen lukumäärää c_{nk} :lla. Kun $n = k$, kyseessä on edellä ratkaistu Catalanin lukuihin johtanut ongelma, eli $c_{nn} = C_n$. Kun $k = 0$, polkuja on vain yhdenlaisia, eli $c_{n0} = 1$ kaikille n . Lisäksi jos alas-askelia otetaan enemmän kuin ylös-askelia, päättyy polku väistämättä jossain vaiheessa nollassa alapuolelle, eli $c_{nk} = 0$ kun $k > n$. Lisäksi sovitaan, että $c_{-1,k} = 0$ kaikille k . Luvuille c_{nk} saadaan rekursiorelaatio helpommin kuin edellisessä tapauksessa, sillä polut voidaan jaotella sen mukaan, onko viimeinen askel alas- vai ylöspäin. Jos viimeinen askel on alas, jää polkuun n askelta ylös ja $k - 1$ alas. Vastaavasti jos viimeinen askel on ylös, jää polkuun $n - 1$ askelta ylös ja k alas. Näin ollen

$$c_{nk} = c_{n-1,k} + c_{n,k-1}. \quad (5.4)$$

Luvut (c_{nk}) muodostavat taulukoituna lukukolmion, ns. *Catalanin kolmion*, jossa kukin luku on aina vasemmanpuoleisen ja yläpuolisen naapurinsa summa. Catalanin kolmion alku on esitetty taulukossa I. Catalanin kolmio sekä siihen johtava rajoitettujen polkujen rekursiorelaatio ovat tunnettuja kombinatorisia tuloksia, jotka päädyttiin tämän tutkimuksen kohdalla "löytämään uudelleen" tarkasteltaessa rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattoreille symbolisen laskennan avulla saatuja tuloksia.

1								
1	1							
1	2	2						
1	3	5	5					
1	4	9	14	14				
1	5	14	28	42	42			
1	6	20	48	90	132	132		
1	7	27	75	165	297	429	429	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Taulukko I. Catalanin kolmio. Lukujen c_{nk} indeksi n kulkee kaaviossa ylhäältä alas ja indeksi k vasemmalta oikealle. Vasen yläkulma on c_{00} . Lukutaulukon diagonaalille muodostuvat Catalanin luvut.

Catalanin kolmion luvuille voidaan johtaa [24] suljetussa muodossa oleva lauseke ratkaisemalla niihin liittyvä rekursiorelaatio (5.4). Tuloksena saadaan

$$c_{nk} = \frac{(n+k)!(n-k+1)}{k!(n+1)!}. \quad (5.5)$$

Kombinatorista lähestymistapaa yritettiin myös kahden kävelijän ongelman tapauksessa, jossa polkujen laskeminen vaikeutuu entisestään. Mielivaltaisissa

graafeissa olevien risteämättömien polkujen laskemiseen on olemassa joitain yleisiä tuloksia, kuten Lindströmin–Gesselin–Viennot’n lause (LGV) [25, 26], jota on jo jossain määrin sovellettu risteämättömien binääripolkujen laskemiseen hieman TwinBCSOS-mallin kaltaisissa tilanteissa [27–31]. Varsin abstraktilla tasolla formuloidun LGV:n soveltaminen binääripolkuihin tasossa ei kuitenkaan ole kovin suoraviivaista. Lisäksi LGV:n soveltamista TwinBCSOS-mallin tapauksessa vaikeuttaa se, että TwinBCSOS-mallissa kävelijöiden askelten todennäköisyydet muuttuvat kävelijöiden kohdatessa. Sama ongelma koskee myös rajoitetun BCSOS-kävelijän polkujen todennäköisyyksien laskemista, joskin joissain lähteissä rajoitettujen polkujen laskemisessa on tarkasteltu myös seinän viereen palautumisen lukumäärää [32]. Lopulta kahden kävelijän polkujen laskeminen LGV:n tai muiden yleisten graafiteorian tulosten avulla katsottiin tämän työn tarpeita ajatellen tarpeettoman monimutkaiseksi lähestymistavaksi. Valmiiden kombinatoristen tulosten löytäminen vaikeuttaa erityisesti yhteisen sanaston puute. Siinä missä yksi fyysikko puhuu nyt käsiteltävien ongelmien kohdalla satunnaiskävelijöistä tai rajapinnoista, toinen fyysikko saattaa puhua vain vesirakkuloista ja polymeeriketjuista, ja matemaatikolle kyse voi olla vain lukujen 1 ja -1 kombinaatioista tai jonkin abstraktin algebrallisen kielen ominaisuuksista. Tämä toisaalta kertoo myös siitä sovellusten kirjosta, jossa risteämättömiin polkuihin liittyvät kombinatoriset tulokset esiintyvät.

5.2 Leveyden yhteys askelkorrelaattoriin

Kuten aiemmin mainittiin, leveyden käsittely suoraan määritelmästä (3.7) käsin käy pian hankalaksi, minkä vuoksi osoittautuu hyödylliseksi pyrkiä yksinkertaistamaan tilannetta palauttamalla ongelma matalamman tason ongelmaan, eli kävelijän askelten välisiin korrelaatioihin. Tässä kohdassa osoittautuu hyödylliseksi palauttaa kävelijän liike kävelijän askelprosessiin, joka on muistiominaisuksiltaan tyypillisesti koko kävelijää yksinkertaisempi. Merkitään askelprosessia $\Delta_i := X_i - X_{i-1}$, eli $X_i = X_0 + \sum_{j=1}^i \Delta_j$, missä voidaan vapaasti asettaa $X_0 = 0$. Askelprosessin avulla ilmoitettuna kävelijän keskimääräinen paikka L :n peräkkäisen ajanhetken otoksessa on

$$\bar{X}_L = \frac{1}{L} \sum_{i=0}^{L-1} X_i = \frac{1}{L} \sum_{i=0}^{L-1} \sum_{j=1}^i \Delta_j = \sum_{i=1}^{L-1} \left(\frac{L-i}{L} \right) \Delta_i.$$

Myös paikan varianssi voidaan esittää askelten Δ_i avulla, mutta eleganttiin muotoon pääseminen vaatii hieman välivaiheita. Paikan varianssi L :n peräkkäisen

ajanhetken otoksessa on

$$\begin{aligned}\text{var}_L(X) &:= \frac{1}{L} \sum_{i=0}^{L-1} (X_i - \bar{X}_L)^2 = \frac{1}{L} \left(\sum_{i=0}^{L-1} X_i \right)^2 - \bar{X}_L^2 \\ &= \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L-1} \left(\sum_{j=1}^i \Delta_j \right)^2 - \left(\sum_{i=1}^{L-1} \frac{L-i}{L} \Delta_i \right)^2,\end{aligned}$$

josta saadaan multinomilauseella varianssille muoto

$$\text{var}_L(X) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L-1} \left(\sum_{j=1}^i \Delta_j^2 + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^i \Delta_j \Delta_k \right) - \sum_{i=1}^{L-1} \left(\frac{L-i}{L} \Delta_i \right)^2 - \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^i \frac{L-j}{L} \cdot \frac{L-k}{L} \Delta_j \Delta_k.$$

Ryhmittelemällä nyt kaikki muotoa Δ_i^2 olevat termit ja ristitermit $\Delta_j \Delta_k$ erikseen saadaan muutaman välivaiheen kautta

$$\text{var}_L(X) = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L-1} i(L-i) \Delta_i^2 + \frac{2}{L^2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{L-1} j(L-k) \Delta_j \Delta_k,$$

josta puolestaan saadaan leveydelle elegantti ja käyttökelpoinen muoto

$$W^2 = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L-1} i(L-i) \mathbb{E}(\Delta_i^2) + \frac{2}{L^2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{L-1} j(L-k) \mathbb{E}(\Delta_j \Delta_k). \quad (5.6)$$

Näin saatiin leveydelle samalla esitys, jossa on eroteltu eksplisiittisesti askelten pituuden $\mathbb{E}(\Delta_i^2)$ ja askelten välisten korrelaatioiden $\mathbb{E}(\Delta_j \Delta_k)$ vaikutus kävelijän leveyteen. Huomattavaa on, että tämä muoto leveydelle saatiin algebrallisesti ilman lisäoletuksia satunnaiskävelijän luonteesta. Lisäksi, vaikka tässä työssä käsiteltävät satunnaiskävelijät liikkuvat diskreeteissä tilajoukoissa, edellä saadun leveyden esityksen johtamisessa ei tätä oletusta tarvittu. Yhtälö (5.6) siis toimisi, vaikka kävelijän askeleet noudattaisivat esimerkiksi normaalijakaamaa.

Usein satunnaiskävelijöiden askelten välinen korrelaatio riippuu vain askelten aikaerosta, eli askelprosessi on tietyssä mielessä aikatranslaatioinvariantti. Tällöin voimme merkitä $\mathbb{E}(\Delta_j \Delta_k) = \phi(|j-k|)$, eli erityisesti $\mathbb{E}(\Delta_i^2) \equiv \phi(0)$. Kun askelten välinen korrelaatio on vain aikaeron funktio, lauseke (5.6) yksinkertaistuu edelleen, sillä tällöin ensimmäisen termin summa sekä toisen termin summista toinen voidaan eksplisiittisesti laskea. Tuloksena saadaan

$$W^2 = \frac{L^2-1}{6L} \phi(0) + \frac{1}{3L^2} \sum_{d=1}^{L-2} (L-d) \left((L-d)^2 - 1 \right) \phi(d). \quad (5.7)$$

Askelkorrelaatiofunktio – kun sellainen on olemassa – määrää siis leveyden täysin, ja siten esimerkiksi eksaktin lausekkeen määrittäminen leveydelle voidaan tehdä jossain mielessä yksinkertaisemman ongelman kautta määrittämällä askelkorrelaatiofunktio.

5.3 Yksinkertaisten kävelijöiden askelkorrelaattori ja leveys

Edellä johdettu esitys (5.7) leveydelle yksinkertaistuu edelleen, mikäli askelprosessi $\{\Delta_n\}$ on täysin muistiton. Tämä erikoistapaus kattaa esimerkiksi vapaat BCSOS- ja RSOS-kävelijät. Askelprosessin ollessa muistiton askeleet Δ_i ovat toisistaan riippumattomia ja samoin jakautuneita, eli $\phi(0) = \mathbb{E}(\Delta_i^2) = \mathbb{E}(\Delta^2)$ ja $\phi(d) = \mathbb{E}(\Delta_i \Delta_{i+d}) = \mathbb{E}(\Delta)^2$. Leveys riippuu siis tässä tapauksessa vain kävelijän askelten Δ todennäköisyysjakauman odotusarvosta ja toisesta momentista:

$$W^2 = \frac{L^2 - 1}{6L} \mathbb{E}(\Delta^2) + \frac{1}{3L^2} \sum_{d=1}^{L-2} (L-d) \left((L-d)^2 - 1 \right) \mathbb{E}(\Delta)^2,$$

josta saadaan muutaman välivaiheen kautta laskemalla jälkimmäinen summa auki

$$W^2 = \left(\frac{L^2 - 1}{6L} \right) \mathbb{E}(\Delta^2) + \left(\frac{L^3 - 2L^2 - L + 2}{12L} \right) \mathbb{E}(\Delta)^2. \quad (5.8)$$

Tässä esityksessä nähdään hyvin leveyden johtavan käyttäytymisen riippuvuus kävelijän liikkeen kahdesta erilaisesta komponentista. Ensimmäinen, vain kävelijän askelten pituudesta riippuva termi kuvaa leveyden riippuvuutta kävelijän liikkeen satunnaisesta komponentista, ja tämä termi skaalautuu suurilla L likimain suoraan verrannollisesti otospituuteen L . Toinen termi puolestaan sisältää riippuvuuden kävelijän askelten mahdollisesta tietyin suunnan suosimisesta, ja tämä termi puolestaan skaalautuu kuten $\sim L^2$, dominoiden ensimmäistä termiä suurilla L .

Riippumattomien askelten leveyden lausekkeesta (5.8) voidaan suoraan ratkaista leveydet esimerkiksi BCSOS- ja RSOS-kävelijöille. BCSOS-kävelijälle $\Delta^2 = 1$ ja $\mathbb{E}(\Delta) = (1 - 2p)$, joka sijoitettuna saatuun yhtälöön (5.8) antaa

$$W_{\text{BCSOS}}^2(p, L) = \frac{L^2 - 1}{6L} + (1 - 2p)^2 \frac{L^3 - 2L^2 - L + 2}{12L}. \quad (5.9)$$

RSOS-kävelijälle puolestaan $\mathbb{E}(\Delta^2) = (p_\uparrow + p_\downarrow)^2$ ja $\mathbb{E}(\Delta) = (p_\uparrow - p_\downarrow)$, joten

$$W_{\text{RSOS}}^2(p_\uparrow, p_\downarrow, L) = \frac{L^2 - 1}{6L} (p_\uparrow + p_\downarrow)^2 + \frac{L^3 - 2L^2 - L + 2}{12L} (p_\uparrow - p_\downarrow)^2. \quad (5.10)$$

BCSOS-kävelijälle saatu biasoimattoman kävelyn leveys $W^2/L \sim 1/6$ on varsin universaali tulos, ja sama tulos⁴ saadaan myös jatkumossa tarkastellusta satunnaiskävelystä [33, 34].

⁴Tulos $1/6$ saadaan käyttämällä vapaita reunaehtoja. Periodisilla reunaehdoilla $X(0) = X(L)$ vastaava tulos on $W^2/L \sim 1/12$.

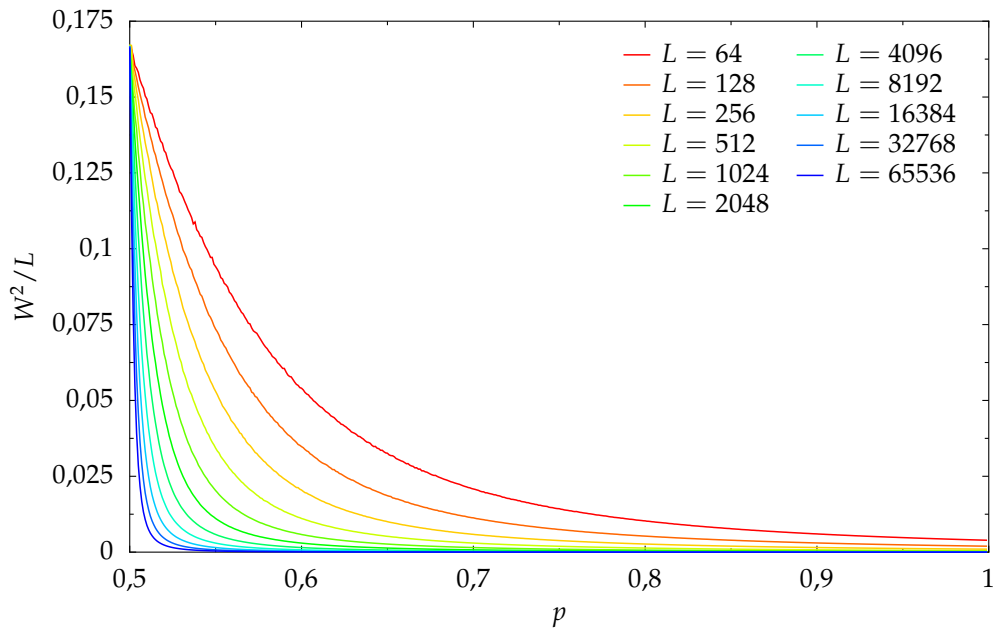
5.4 Rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattori ja leveys

Rajoitetun BCSOS-kävelijän (ks. kappale 3.4) leveyden ratkaiseminen on askelten välisten korrelaatioiden vuoksi huomattavasti monimutkaisempaa kuin aiemman vapaan BCSOS-kävelijän tapauksessa. Heikon ja voimakkaan ajon triviaalirajat ovat kuitenkin helposti ratkaistavissa. Kun kävelijän seinää kohti kokeman ajon voimakkuutta kuvaava parametri $p \leq 1/2$, kävelijä ei efektiivisesti näe seinää lainkaan, ja siten käyttäytyy kuten vapaa BCSOS-kävelijä. Kun $p = 1/2$, rajoitetun BCSOS-kävelijän leveys on siis $W_{\text{rBCSOS}}^2(1/2, L) = (L^2 - 1)/(6L)$. Rajalla $p = 1$ kävelijä puolestaan pysyttelee niin lähellä seinää kuin mahdollista, vuorotellen vain tilojen $X = 0$ ja $X = 1$ välillä. Tällöin parillisille L kävelijän leveys on tasan $1/4$. Näiden rajojen välissä leveys jollain tavalla laskee rajan $p = 1/2$ arvosta rajan $p = 1$ minimiarvoon, ajon puristaessa kävelijää yhä tiukemmin seinään kiinni.

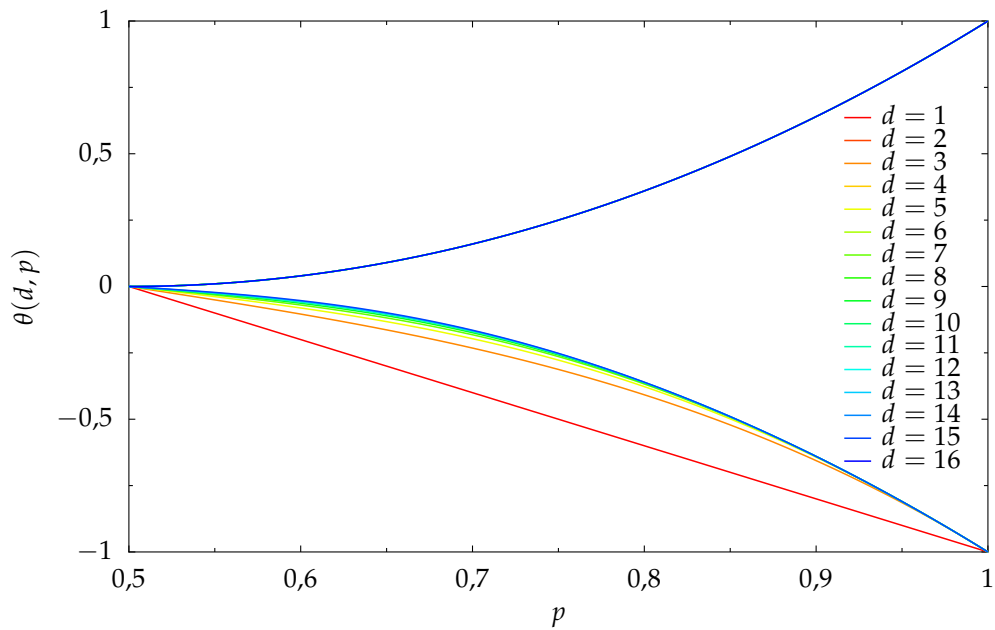
Kävelijän leveyden tarkemman käyttäytymisen selvittämiseksi sitä tutkittiin edellisessä luvussa kuvatulla Monte Carlo -simulaatiolla. Simulaation tulokset on esitetty kuvassa 3. Jotta eri otospituuksilla lasketut tulokset saadaan sopimaan samaan kuvaan, leveys on kuvassa skaalattu otospituudella L . Kuvasta nähdään, että ajoparametrin p kasvaessa skaalattu leveys laskee siististi arvosta $W^2/L \approx 1/6$ arvoon $W^2/L \approx 0$ laskun ollessa sitä jyrkempi mitä suurempi otospituus on kyseessä. Suuren otoksen rajalla skaalattu leveys tipahtaa nolnaan heti kun kävelijä jollain tavalla suosii seinää kohti liikkumista.

Rajoitetun BCSOS-kävelijän leveyden käyttäytyminen on MC-simulaatioiden perusteella varsin monotonista, eikä kuvan 3 leveysdatasta ole siten enää saatavissa tämän mielenkiintoisempia tuloksia. Leveydelle saatujen tulosten – ja toisaalta koko mallin – yksinkertaisuus antaa kuitenkin toivoa olettaa, että myös leveyden eksakti käyttäytyminen voi olla ratkaistavissa. Tällaisen ratkaisun löytämiseksi on hyvä ensin pyrkiä hyödyntämään aikaisempia tuloksia palauttamalla leveyden ratkaiseminen yksinkertaisempaan ongelmaan eli kävelijän askelten autokorrelaatiofunktioon $\theta(d, p)$. Askelkorrelaattorin käyttäytymisen selvittämiseksi myös sitä arvioitiin Monte Carlo -simulaatiolla, jonka tulokset on esitetty kuvassa 4. Kaikilla d korrelaatiot ovat odotettavasti nollija kun $p = 1/2$, ja rajalla $p = 1$ korrelaatiot ovat d :n pariteetista riippuen ± 1 , sillä tällä rajalla kävelijä kulkee siksakkia seinän vieressä. Yllättävänä tuloksena sen sijaan MC-simulaatiodatasta nähdään, että kaikki parillisen d :n korrelaattorit näyttäisivät pakkautuvan samalle käyrälle, joka sattuu lisäksi olemaan vapaan kävelijän korrelaattori $\theta_0(p) = (2p - 1)^2$. Parillisen askelmäärän etäisyydellä toisistaan otetut askeleet ovat siis myös heijastavan seinän läsnäollessa toisistaan riippumattomia. Parittoman d :n korrelaattorit puolestaan näyttävät lähestyvän d :n kasvaessa alhaalta päin käyrää $\theta = -\theta_0$.

Monte Carlo -tulosten varmistamiseksi ja eksaktien lausekkeiden selvittämiseksi rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattoreita laskettiin myös symbolisesti etäisyydelle $d = 25$ saakka. Symbolinen laskenta toi vahvistusta MC-simulaatioiden tulokseen, jonka mukaan $\theta(d, p) = \theta_0(p)$ parillisille d . Syytä tähän ei osattu selittää, mutta tämä hieman erikoinen tulos antoi lisää motivaatioita



Kuva 3. Monte Carlo -menetelmällä arvioitu rajoitetun BCSOS-kävelijän skaalattu leveys ajoparametrin p funktiona. Tulokset kullekin otospituudelle L on arvioitu 2^{17} polun otoksesta.



Kuva 4. Monte Carlo -menetelmällä arvioitu rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattori ajoparametrin p ja etäisyyden d funktiona. Tulokset kullekin p on arvioitu 2^{30} polun otoksesta.

tutkia alunperin yksipuoliselta vaikuttanutta rajoitetun BCSOS-kävelijän mallia. Symbolisen laskennan tuloksia tarkasteltaessa luonnolliseksi muuttujaksi osoit-
tautui ajoparametrin p sijasta $r := 2p - 1$, jonka avulla lausuttuna $\theta_0(r) = r^2$.
Erityisesti kaikille parittoman d :n korrelaattoreille löytyi yhteinen esitysmuoto, jo-
ka koostuu kaikille korrelaattoreille yhteisestä tekijästä $-r$, rationaalikertoimesta
muotoa 2^{-n} , missä n kasvaa d :n mukana, sekä kokonaislukukertoimisesta, vain
parillisen kertaluvun termejä sisältävästä r :n polynomista astetta $d - 1$. Saadut
lausekkeet löytyvät liitteestä B.

Koska parittomien d :n arvojen korrelaattorien polynomiosille ei löydetty mi-
tään ilmeistä rekursiorelaatiota, niitä päädyttiin lopulta tutkimaan piirtämällä
niiden nollakohdat kompleksitasoon. Koska polynomi määräytyy yksikäsitteises-
ti sen nollakohtien kautta, tämä on jollain tavalla luonnollinen tapa hahmottaa
polynomijonon käyttäytymistä. Kuvat nollakohtien muodostamista pistejoukois-
ta löytyvät liitteen D kuvasta 13. Vaikka mitään yksinkertaisen systematiikan
mukaan käyttäytyviä tekijöitä ei nollakohtien käyttäytymistä tutkimalla löydetty,
selvä kvalitatiivinen systematiikka nollakohtien liikkeistä on havaittavissa. Nol-
lakohtien huomattiin pakkautuvan d :n kasvaessa siististi muodostelmaan, joka
koostuu kahdesta toisiaan lähestyvistä, puhtaasti imaginaarisesta juuresta sekä
niiden ympärille muodostuvista C :n muotoisista kaarista.

Varsinainen läpimurto korrelaattorin ratkaisemisessa saatiin kun symbolisesti
lasketuista korrelaattoreista vähennettiin suuren d :n raja, eli tutkittiin funktioita
 $\theta(d, r) + r^2$. Tällä muutoksella saadut nollakohtakuvaajat on esitetty liitteen D
kuvassa 14. Kun suuren d :n raja vähennettiin, toinen nollakohtien muodostamista
 C -kaarista romahti yhdeksi $(\lfloor d/2 \rfloor + 1)$ -kertaiseksi juureksi kohdassa $r = -1$.
Kun tämä tekijä jaettiin pois, jäljelle jäävien polynomien kertoimista alkoi erot-
tua selvää systematiikkaa. Polynomien kertoimet osoittautuivat lopulta Catalanin
kolmion kertoimiksi, ja näin symbolisen laskennan kautta päädyttiin löytämään
yhteys BCSOS-kävelijän polkujen ja jo tunnetun kombinatorisen tuloksen välil-
lä. Lopullinen tulos rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorille, joka siis
symbolisella laskennalla tarkistettiin etäisyydelle $d = 25$ saakka on

$$\theta(d, r) = \begin{cases} r^2 & \text{kun } d \text{ on parillinen,} \\ r^2 - 2^{-i} r (1+r)^{i+1} \left(1 + \sum_{k=1}^{i-1} c_{i-1,k} \left(\frac{1-r}{2} \right)^k \right) & \text{muulloin,} \end{cases} \quad (5.11)$$

missä $i = \lfloor d/2 \rfloor$. Koska ratkaisussa esiintyvän polynomien kertoimet ovat Catalanin
kolmion lukuja ja koska näiden polynomien nollakohdat piirtävät kompleksi-
tasoon C :n muotoisen kaaren, on luontevaa nimetä ne *Catalanin polynomeiksi*

$$C_n(z) := \sum_{k=0}^n c_{n,k} z^k. \quad (5.12)$$

Tällä määrittelyllä saatu tulos rajoitetun BCSOS-kävelijän korrelaattorille parittomille $d > 1$ on

$$\theta(i, r) = r^2 - 2r \left(\frac{1+r}{2}\right)^{i+1} C_{i-1} \left(\frac{1-r}{2}\right),$$

eli

$$\theta(i, p) = (2p - 1)^2 - 2(2p - 1)p^{i+1}C_{i-1}(1 - p).$$

Vaikka tälle tulokselle ei tässä vaiheessa ole muuta perustelua kuin symbolisen laskennan tulokset, ei ole syytä olettaa, että jollain hyvin suurella d lausekkeeseen tulisi jokin korjaustermi. Saatua korrelaattorin lauseketta verrattiin lisäksi Monte Carlo -simulaatioilla saatuihin korrelaattoreihin, ja tulokset olivat MC-simulaation tarkkuuden rajoissa yhtenevät.

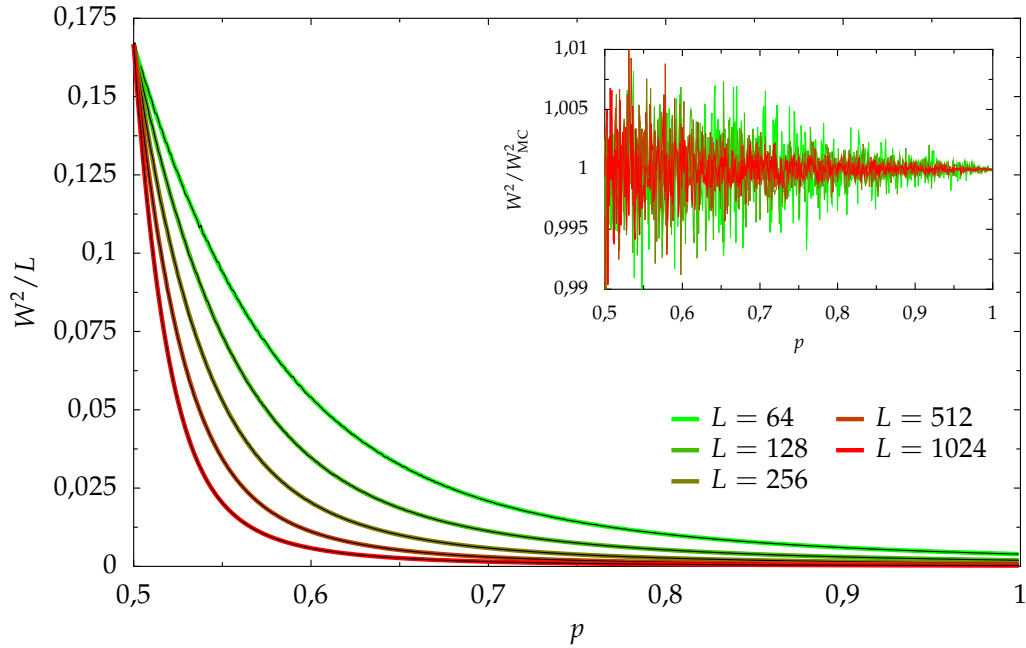
Saadusta tuloksesta (5.11) voidaan lauseketta (5.7) käyttämällä johtaa myös lauseke rajoitetun BCSOS-kävelijän leveydelle W_{rBCSOS}^2 . Kaikilla d korrelaatioissa esiintyvä termi r^2 on vapaan BCSOS-kävelijän askelkorrelaattori, joten summaamalla tämä osa korrelaattoreista saadaan vapaan BCSOS-kävelijän leveys (5.9). Ottamalla mukaan parittomilla d korrelaattoreissa esiintyvät korjaustermit saadaan lopulta alkuperäisen ajoparametrin p avulla lausuttuna

$$\begin{aligned} \frac{W_{\text{rBCSOS}}^2}{L} - \frac{W_{\text{BCSOS}}^2}{L} &= -\frac{2}{3}p^2(2p - 1) \cdot \\ &\cdot \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{L}{2} \rfloor - 1} \left(1 + \sum_{k=1}^{i-1} \left(1 - \frac{2i+1}{L} \right) \left(\left(1 - \frac{2i+1}{L} \right)^2 - \frac{1}{L^2} \right) c_{i-1,k} p^{i-1} (1-p)^k \right). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Myös tätä tulosta verrattiin aikaisemmin Monte Carlo -simulaatioista saatuun leveyteen, ja tulokset olivat yhtenevät. Kuvassa 5 yhtälön (5.13) antama leveys sekä MC-simulaatioista saatu leveys on piirretty muutamille L aina $L = 1024$ saakka. Tulosten yhteneväisyys myös hyvin suurille L asti antaa lisää syytä olettaa, että symbolisen laskennan avulla etsitty yleinen muoto rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorille pätee myös suurilla d .

5.5 TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattori ja leveys

Kappaleessa 3.5 esitellyssä TwinBCSOS-mallissa kaksi BCSOS-tyyppistä kävelijää liikkuvat yhdessä ulottuvuudessa siten, että kävelijät eivät voi ohittaa toisiaan. Mallissa molempien kävelijöiden leveydet ovat ilmeisen symmetrian vuoksi samat, joten voidaan puhua TwinBCSOS-mallin leveydestä tarkoittaen kumman tahansa kävelijän leveyttä. Kun rajoitetun BCSOS-kävelijän katsotaan kuvaavan yksiulotteista rajapintaa kovan seinän vieressä, TwinBCSOS-mallin voidaan katsoa olevan tuon tilanteen laajennus tapaukseen, jossa myös seinä voi liikkua,



Kuva 5. Symbolisen laskennan avulla saatu rajoitetun BCSOS-kävelijän leveys (5.13) verrattuna MC-simulaatioista saatuun leveyteen. Värilliset, paksut viivat kuvaavat lausekkeen (5.13) leveyttä ja ohuet mustat viivat MC-simulaatioista saatua leveyttä. Pieneen kuvaan on piirretty eri menetelmillä laskettujen leveyksien osamäärä. Kuvista nähdään, että tulokset ovat Monte Carlo -simulaation tarkkuuden rajoissa yhtenevät myös suurille L asti, eikä systemaattisia poikkeamia tulosten välillä ole.

vieläpä erityisesti siten, että tarkasteltava rajapinta ja seinä ovat kaikin tavoin tasa-arvoisia.

TwinBCSOS-mallin dynamiikkaa parametriseoi vain yksi parametri p , joka kuvaa kävelijöitä toisiaan vasten ajavan voiman suuruutta. Kun $p = 1/2$, kävelijät liikkuvat ohituskieltoa lukuun ottamatta yhtä todennäköisesti ylös tai alas, ja kävelijöiden välinen kytkentä siten efektiivisesti katkeaa, sillä kävelijöiden kohtaamisen välinen aika on tällöin odotusarvoltaan ääretön. Rajalla $p = 1/2$ kävelijät siis liikkuvat kuin toisistaan riippumattomat BCSOS-kävelijät, ja siten kävelijöiden leveydet lähestyvät biasoimattoman BCSOS-kävelijän leveyttä $W^2 = \frac{1}{6L}(L^2 - 1)$. Parametrin p kasvaessa kävelijät kohtaavat toisensa yhä useammin, ja siten ohituskiellon toteutus vaikuttaa leveyden käyttäytymiseen yhä enemmän. Bosonisen ohituskiellon tapauksessa suurilla p kävelijät pysyvät ensimmäisen kohtaamisensa jälkeen lähes paikallaan, sillä tällöin lähes joka askeleella kävelijät törmäävät toisiinsa ja kimpoavat takaisin lähtöpaikkoihinsa. Siten suuren p :n rajalla bosonisella ohituskiellolla varustettujen kävelijöiden leveys on hyvin pieni. Fermionisen ohituskiellon tapauksessa kävelijät pysyttelevät suurilla p samalla tavalla toistensa lähistöllä, mutta bosonisesta tapauksesta poiketen ne eivät jämähdä paikalleen, vaan ryhtyvät liikkumaan yhdessä. Rajalla $p = 1$ kävelijät eivät voi kerran kohdat-

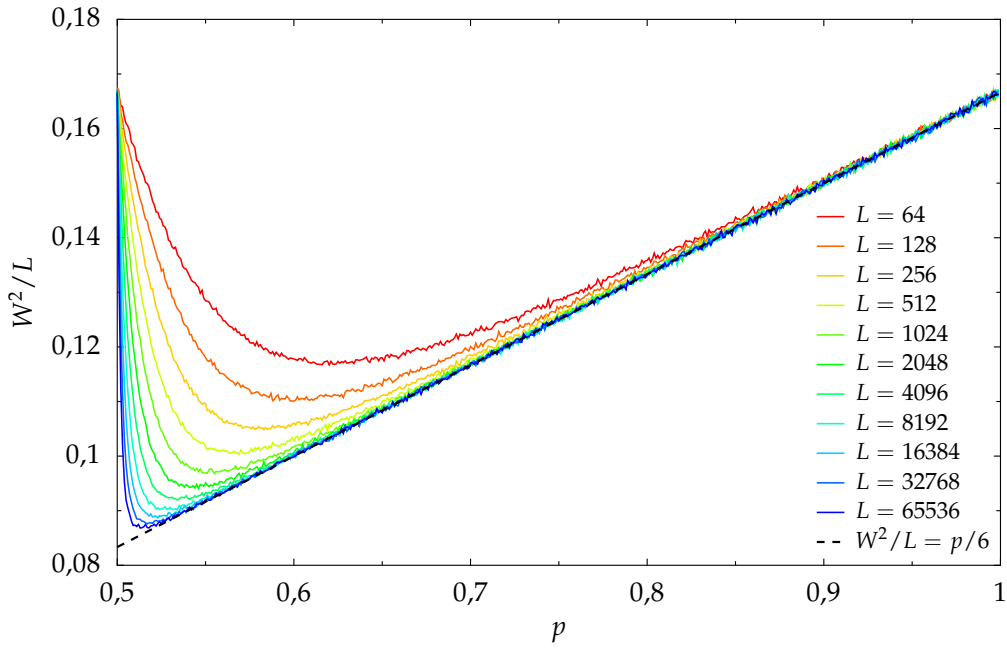
tuaan enää erota, vaan liikkuvat jatkossa kuin yksi biasoimaton BCSOS-kävelijä. Fermionisten kävelijöiden käyttäytyminen lähestyy siis biasoimattoman yhden kävelijän käyttäytymistä molemmilla rajoilla $p = 1/2$ ja $p = 1$. Fermionisen mallin leveydestä löytyy siis luultavasti jonkinlainen minimi välialueessa $1/2 < p < 1$, sillä kävelijöiden välinen attraktio oletettavasti pienentää leveyttä p :n ollessa hieman yli puolikkaan. Tällaisen erikoispisteen olemassaolo tekee fermionisen TwinBCSOS-mallin leveyden tutkimisesta aikaisempia tapauksia mielenkiintoisempaa.

Myös TwinBCSOS-mallin leveyttä tutkittiin ensin Monte Carlo -simulaatiolla. Simulaatiosta saadut tulokset fermionisen ja bosonisen ohituskiellon tapauksista on esitetty kuvasarjassa 6. MC-simulaatiot vahvistivat aikaisempia arvioita leveyden käyttäytymisestä sekä antoivat riittävän tarkkoja tuloksia esimerkiksi fermionisen mallin leveyden minimin tarkempaan tutkimiseen.

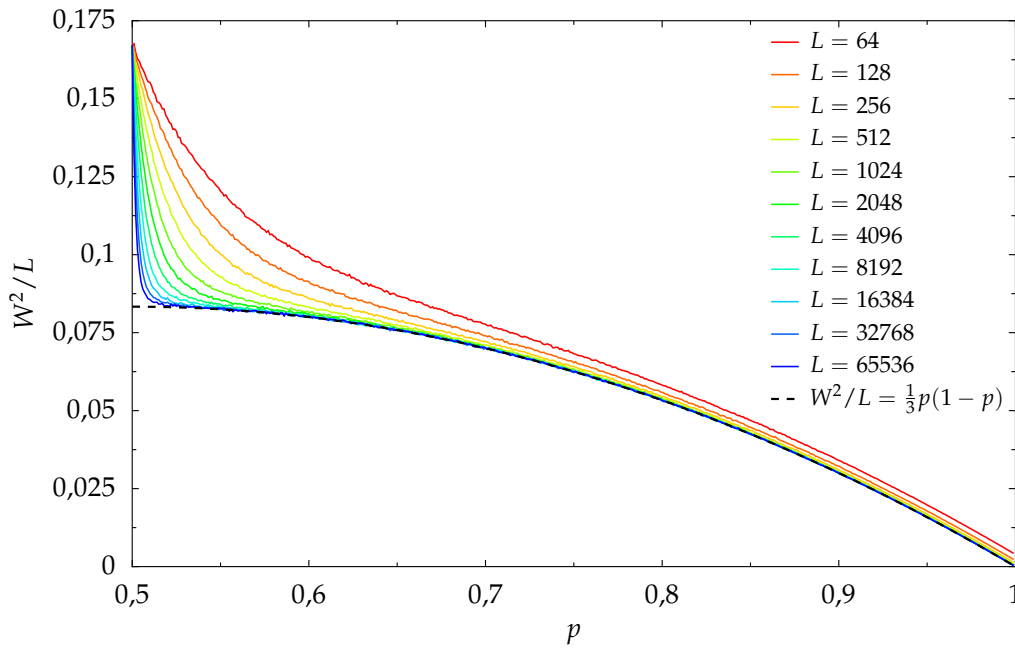
Pienillä p kävelijät kohtaavat harvoin, ja siten odotetusti ohituskiellon toteutuksella ei ole juurikaan vaikutusta leveyden käyttäytymiseen, kuten vertailemalla kuvien 6a ja 6b pienen p :n rajaa nähdään. Huomattavaa on, että tälläkin rajalla leveys kuitenkin eroaa oleellisesti rajoitetun BCSOS-kävelijän leveydestä. Yksinkertainen selitys tälle on se, että koska ajoparametrin kasvaessa TwinBCSOS-mallissa *molemmat* rajapinnat kulkevat todennäköisemmin toisiaan kohti, kävelijöiden kohtaamisten välinen keskimääräinen aika lyhenee p :n kasvaessa TwinBCSOS-mallin kohdalla nopeammin kuin rajoitetun BCSOS-kävelijän tapauksessa.

Ajoparametrin p kasvaessa ohituskiellon toteutus määrää yhä enemmän kävelijäparin käyttäytymistä. Fermionisella ohituskiellolla leveys lähtee alun jyrkän pudotuksen jälkeen kasvamaan takaisin kohti vapaan kävelijän leveyttä, ja leveys todella saavuttaa selkeän minimin, joka pienenee otospituuden kasvaessa. Bosonisessa tapauksessa leveys puolestaan laskee monotonisesti loppuun asti, joskin leveyden väheneminen hidastuu niillä paikkeilla jossa fermionisen mallin leveys saa miniminsä. Fermionisen mallin leveyden minimiä vastaavan ajovoimakkuuden voidaan siis katsoa kuvaavan eräänlaista kahden kävelijän mallin siirtymäpistettä, jossa kävelijöiden kytkäytyminen yhteen muuttuu leveyden kannalta määrääväksi tekijäksi. Molemmissa tapauksissa otospituuden kasvaessa pienillä p tapahtuva leveyden jyrkkä lasku jyrkkenee entisestään, mutta suuremmilla p skaalatut leveydet W^2/L eri otospituuksille pakkautuvat melko tarkasti samalle käyrälle. Yllättävinä tuloksina molemmissa tapauksissa skaalatun leveyden W^2/L rajakäyttäytyminen suuren L :n rajalla on varsin yksinkertaista muotoa. Fermionisessa tapauksessa skaalattu leveys lähestyy suoraa $W^2/L = p/6$ ja bosonisessa tapauksessa toisen asteen polynomia $W^2/L = \frac{1}{3}p(1 - p)$.

Fermionisen mallin tapauksessa leveyden käyttäytymisen ehkä mielenkiintoisin ominaisuus on leveyden minimin paikka ja sen riippuvuus otospituudesta. Tämän vuoksi MC-simulaatioista pyrittiin määrittämään kuinka nopeasti leveyden minimi W_{\min}^2 ja sitä vastaava ajoparametri p_{\min} lähestyvät raja-arvojaan L :n kasvaessa. Simulaatioiden perusteella leveyskäyrät hivuttautuvat otospituuden kasvaessa lähemmäksi ja lähemmäksi rajasuoraa $W^2/L = p/6$, jolloin $p_{\min} \rightarrow 1/2$

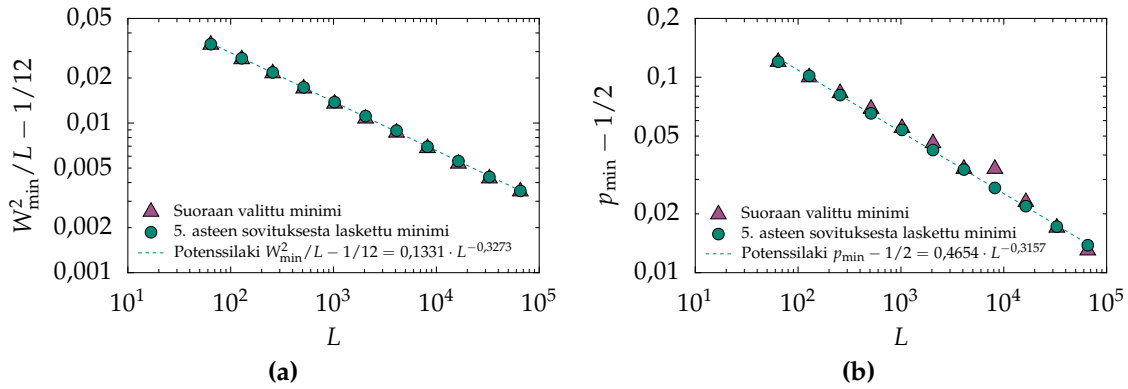


(a) Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveys eri otospituuksilla. Kuvaan on piirretty myös rajasuora $W^2/L = p/6$, jota skaalattu leveys näyttää lähestyvän suurilla L .



(b) Bosonisen TwinBCSOS-mallin leveys eri otospituuksilla. Kuvaan on piirretty myös rajakäyrä $W^2/L = \frac{1}{3}p(1-p)$, jota skaalattu leveys näyttää lähestyvän suurilla L .

Kuva 6. Monte Carlo -menetelmällä arvioitu fermionisen TwinBCSOS-mallin leveys ajoparametrin p funktiona eri otospituuksilla L fermionisella (a) ja bosonisella (b) ohituskiellolla. Tulokset kullekin otospituudelle on arvioitu 2^{17} polun otoksesta.



Kuva 7. Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveyden minimin W_{\min}^2/L ja minimiä vastaavan ajoparametrin arvon p_{\min} skaalautuminen rajalla $L \rightarrow \infty$ kuvan 6a simulaatiodatan perusteella. Kuvaan on piirretty suoraan datapisteistä valitut minimit, sekä minimit, jotka on saatu sovittamalla leveyskäyrän pohjan lähistölle 5. asteen polynomi. Kuvassa näkyy myös polynomisovitukselta saatuihin minimeihin sovitettu potenssilaki.

ja $W_{\min}^2 \rightarrow 1/12$ kun $L \rightarrow \infty$. Koska minimin paikka suoraan kuvan 6a datapisteistä valittuna on hyvin herkkä simulaatiodatoiden epätarkkuudelle, leveyskäyrien pohjan paikkaa haettiin myös sovittamalla pohjan lähistölle viidennen asteen polynomi. Näin saadaan minimin paikka määritettyä hieman tarkemmin, joskin tuloksen tarkkuutta edelleen rajoittaa suuren L :n rajalla pohjan lähistöllä olevien datapisteiden pieni määrä. Lisäksi mielivaltaisesti valittu sijoituksen muoto saattaa aiheuttaa pientä systemaattista virhettä minimin sijaintiin.

Kuvasarjassa 7 on esitetty erotuksien $W_{\min}^2/L - \frac{1}{12}$ ja $p_{\min} - \frac{1}{2}$ käyttäytyminen L :n funktiona simulaatiodatoiden perusteella. Kuvasta nähdään, että sekä polynomisovituksella määritetty minimileveys että sitä vastaava ajoparametrin arvo skaalautuvat hyvin tarkasti jonkin potenssilain mukaisesti. Sovittamalla suorat kuvien 7a ja 7b pisteisiin saadaan potenssilakien eksponenteiksi W_{\min}^2/L :n tapauksessa $-0,327 \pm 0,005$ ja p_{\min} :n tapauksessa $-0,316 \pm 0,009$. Virhearviot tässä sisältävät vain suoran sovituksesta saatavat arviot kulmakertoimen virheelle – tulosten todellinen epätarkkuus on oletettavasti suurempi minimin sijainnin määrittämisessä syntyvän systemaattisen virheen vuoksi. Hyvä tulosten tarkkuuden rajoissa oleva arvaus leveyden minimin skaalaukselle on siis $(W_{\min}^2/L - \frac{1}{12}) \sim L^{-1/3}$ ja $(p_{\min} - \frac{1}{2}) \sim L^{-1/3}$, sillä todellinen skaalauseksponentti on luultavasti rationaaliluku⁵. Leveyden minimiin liittyvän skaalauseksponentin arvo $-1/3$ on sopusoinnussa samankaltaiselle mutta dynaamiselle kahden rajapinnan mallille

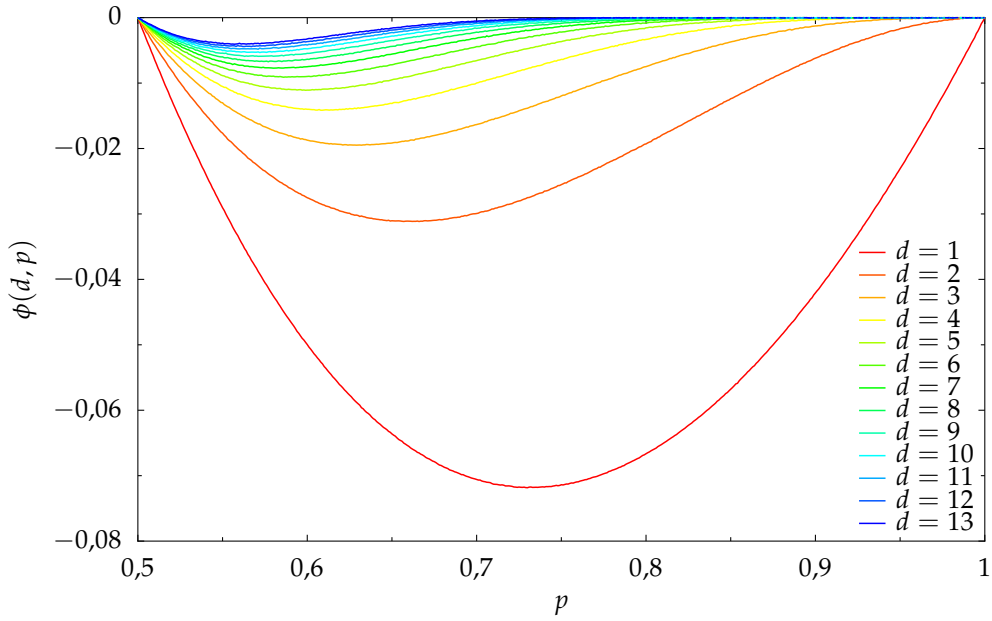
⁵Skaalauseksponenttien rationaalisuus seuraa mataladimensioisille malleille varsin yleisestä symmetriaominaisuudesta nimeltään *konformi-invarianssi* [35]. Tässä tapauksessa rationaalinen skaalauseksponentti jää kuitenkin vain valistuneen arvauksen tasolle, sillä syvällisempi analyysi mallin symmetriaominaisuuksista olisi luultavasti erittäin työläs, etenkin kun tarkasteltavana on keskiarvosuureen *minimin* skaalautuminen.

saatujen tulosten kanssa [36].

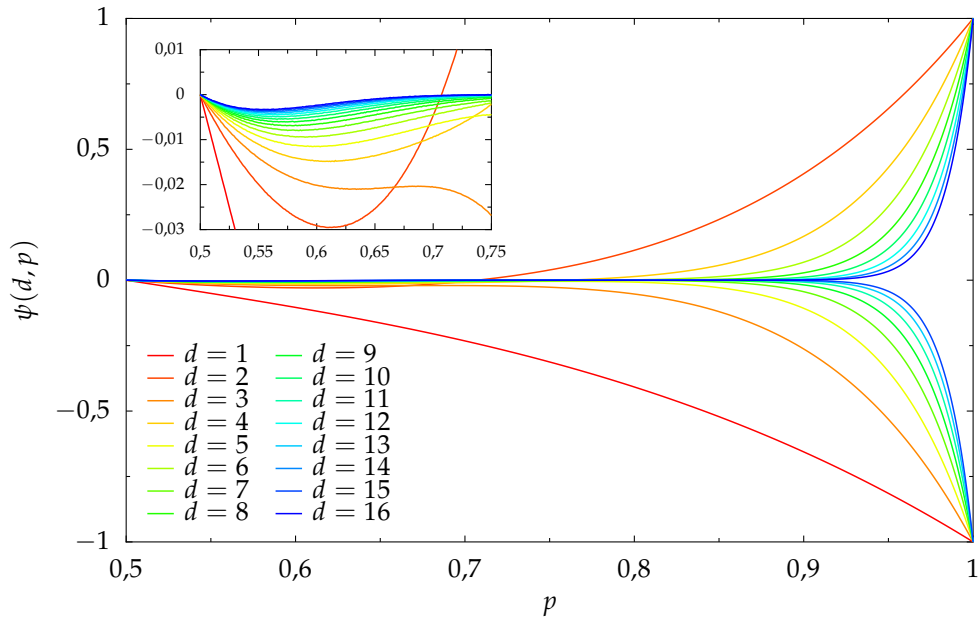
Edellä määritettyä skaalausominaisuutta yritettiin johtaa myös laskemalla MC-simulaatioista saaduista tuloksista lineaariset approksimaatiot leveydelle pisteen $p = 1/2$ ympäristössä ja tarkastelemalla näiden suorien ja rajasuoran $W^2/L = p/6$ leikkauspisteitä. Koska tämä leikkauspiste ja leveyden minimi lähestyvät otospituuden kasvaessa toisiaan, on myös toivoa olettaa, että molemmat skaalautuvat samalla tavalla. Skaalausta pyrittiin määrittämään myös tätä kautta siksi, että mikäli leveyden minimin skaalaus voidaan näin perustella, riittää jatkossa perustella vain leveyden ensimmäisen kertaluvun käyttäytyminen pienen p :n rajalla. Menetelmän tarkkuutta kuitenkin rajoittaa epätarkkuus leveyden lineaarisen approksimaation määrittämisessä sekä se, että leveyden minimi on selvästi erillään suorien leikkauspisteestä aina suurimmillekin käsitellyille otospituuksille asti. Leikkauspisteen paikasta saatu skaalauseksponentti olikin lähempänä lukua $-1/2$ kuin edellä saatua eksponenttia $-1/3$. Menetelmän epäluotettavuuden ja tulosten epätarkkuuden vuoksi ei kuitenkaan katsottu aiheelliseksi epäillä aikaisempaa tulosta.

Kuten edellä, myös TwinBCSOS-mallin kohdalla seuraava askel oli ryhtyä tutkimaan mallin askelkorrelaatiofunktioita ja sitä, voidaanko leveyden käyttäytyminen ratkaista tai joitain sen ominaisuuksia selittää askelkorrelaattorin kautta. Epäselvyyksien välttämiseksi jatkossa fermionisen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattoria merkitään $\phi(d, p)$:llä ja bosonisen $\psi(d, p)$:llä. Monte Carlo -simulaatioista saadut tulokset näille korrelaattoreille on esitetty kuvasarjassa 8. Ohituskiellon vaikutus suuren p :n rajalla on korrelaattorin tapauksessa entistäkin merkittävämpi – kuvista 8a ja 8b nähdään, että fermionisen ja bosonisen mallin korrelaattorit eivät suuren p :n rajalla juurikaan muistuta toisiaan. Fermionisen mallin tapauksissa askelten väliset korrelaatiot ovat kauttaaltaan melko heikkoja ja ei-positiivisia. Lisäksi kuten leveydessäkin, myös eri d :n korrelaattoreissa on selkeä minimi, jonka jälkeen kävelijöiden kytkeytyminen alkaa viemään korrelaatioita takaisin nollaan. Suoraa yhteyttä tämän minimin ja leveyden minimin välillä ei kuitenkaan ole, sillä yhtälön (5.7) mukaan leveys saadaan painotettuna summana korrelaattoreista, eikä siten esimerkiksi minimien skaalausominaisuuksilla ole välttämättä mitään yhteyttä toisiinsa. Bosonisen mallin korrelaattori käyttäytyy pienillä p fermionisen mallin korrelaattorin tavoin, mutta kävelijöiden jumiutuminen paikalleen ryhtyy pian dominoimaan korrelaattorin käyttäytymistä. Rajalla $p = 1$ bosonisen mallin korrelaattorit ovat odotettavasti d :n pariteetista riippuen ± 1 .

Suuren d :n rajan tutkimiseksi korrelaattoreita laskettiin MC-simulaatioista etäisyydelle $d = 128$ asti. Tulosten perusteella fermionisen mallin korrelaattori lähestyy nollaa kaikilla p , joskin suppeneminen on varsin hidasta. Vastaavasti bosonisen mallin korrelaattori näyttää lähestyvän nollaa kaikille $p < 1$. Rajoitetun BCSOS-kävelijän tapauksesta poiketen TwinBCSOS-mallin askelten korrelaatiot siis häviävät – joskin hitaasti – aikaeron kasvaessa, poislukien mahdollinen erikoistapaus $p = 1$. TwinBCSOS-mallilla ei myöskään näytä olevan rajoitetun BCSOS-kävelijän tavoin sellaista ominaisuutta, että korrelaattorit parittomille tai

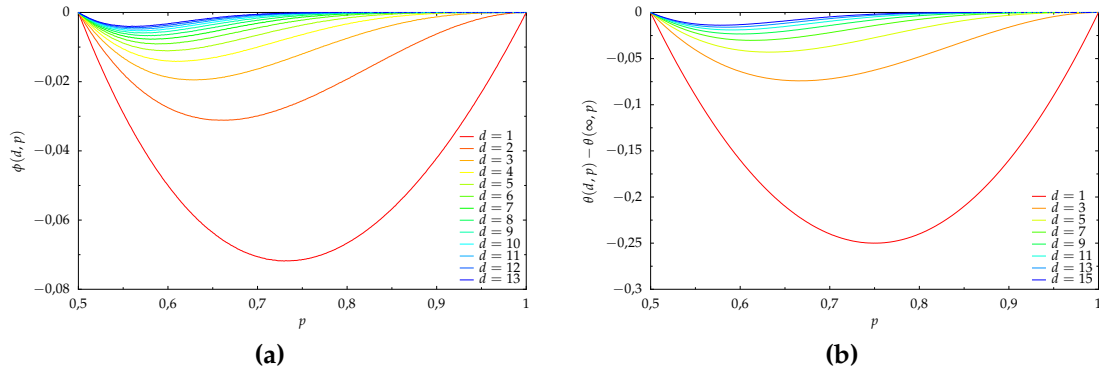


(a) Fermionisen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattori.



(b) Bosonisen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattori. Pieneen kuvaan on piirretty suurennos heikon korrelaation ja pienen p :n alueesta, jossa yhtäläisyys fermioniseen malliin on paremmin nähtävissä.

Kuva 8. Monte Carlo -menetelmällä arvioidut fermionisen (a) ja bosonisen (b) Twin-BCSOS-mallin askelkorrelaattorit ajoparametrin p ja etäisyyden d funktiona. Tulokset kullekin p on arvioitu 2^{30} polun otoksesta. Huomaa erityisesti kuinka dramaattinen vaikutus ohituskiellon vaihtamisella on askelkorrelaattorin muotoon suuren p :n rajalla.

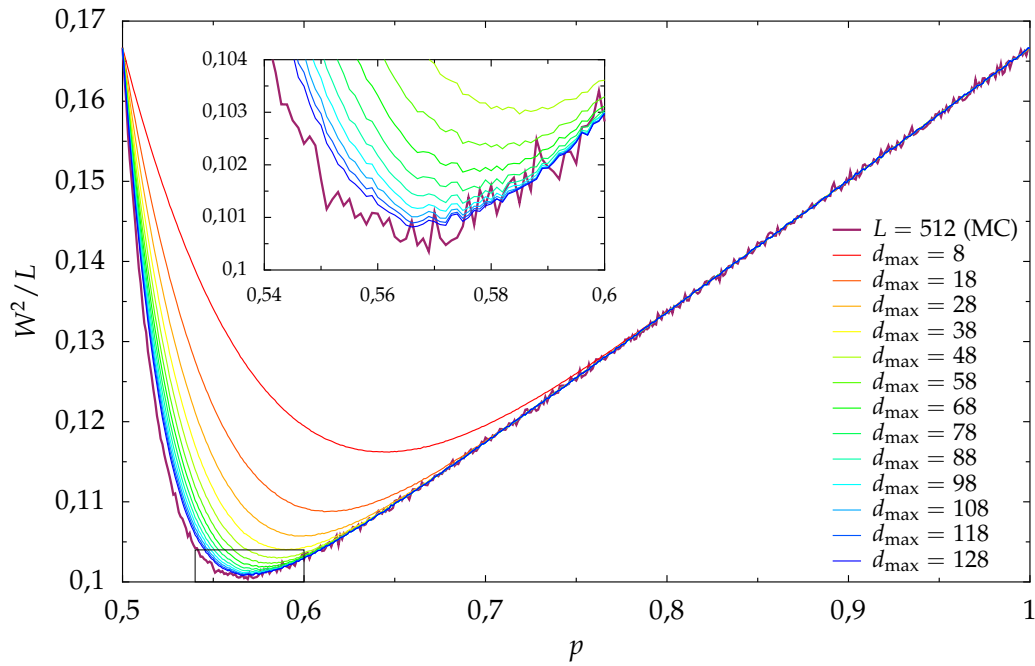


Kuva 9. Fermionisen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattori (a) verrattuna rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattoriin parillisilla d (b) kun korrelaattoreista on vähennetty suuren d :n raja. Fermionisen TwinBCSOS-mallin tapauksessa korrelaattorien suuren d :n raja on nolla, joten kuva (a) on vain toisinto kuvasta 8a. Kuten kuvista nähdään, tällä muutoksella kahden mallin korrelaattoreissa on nähtävissä selvää kvalitatiivista samankaltaisuutta.

parillisille d olisivat merkittävästi yksinkertaisempia. Siirryttäessä rajoitetusta BCSOS-kävelystä kahden kävelijän malleihin jokin yksinkertaiset parillisen d :n korrelaattorit aiheuttava symmetria siis oletettavasti rikkoutuu.

Tietty yhtäläisyys fermionisen TwinBCSOS-mallin ja rajoitetun BCSOS-kävelijän korrelaattoreissa on kuitenkin nähtävissä, mikäli tarkastellaan erotusta, joka saadaan vähentämällä korrelaattoreista suuren d :n raja, eli tarkastellaan suuretta $\theta(d, p) - \lim_{d \rightarrow \infty} \theta(d, p)$. Rajoitetulle BCSOS-kävelijälle tämä siis tarkoittaa sitä, että parillisen d :n korrelaattoreista vähennetään $-(2p - 1)^2$. Fermionisen TwinBCSOS-mallin tapauksessa $\phi(\infty, p) = 0$, eli suuren d :n rajan vähentämisellä ei ole vaikutusta. Korrelaattorit näillä muutoksilla on piirretty vierekkäin kuvasarjaan 9. Kuvista on selvästi nähtävissä kvalitatiivinen samankaltaisuus korrelaattorien välillä. Tämän innoittamana kahden kävelijän korrelaattoreita yritettiin palauttaa rajoitetun kävelijän korrelaattoreihin, joiden lauseke tunnetaan. Mitään yksinkertaista korrelaattoreita toisiksi kuvaavaa muunnosta ei etsinnöistä huolimatta kuitenkaan löytynyt.

TwinBCSOS-mallin leveyden ja askelkorrelaattorien yhteyttä tutkittaessa päädyttiin myös kokeilemaan, minkälaisia approksimaatioita leveydelle lauseke (5.7) antaa, mikäli korrelaatiot katkaistaan joltain kiinteältä etäisyydeltä d_{\max} . Oletettavasti suuren p :n rajalla tällaisella katkaisulla ei pitäisi olla suurta vaikutusta, sillä tällä rajalla kävelijät kohtaavat usein ja askelten väliset korrelaatiot häviävät siten hyvin nopeasti d :n kasvaessa. Kuvassa 10 on esitetty MC-simulaatioista saatujen korrelaattorien ja lausekkeen (5.7) osasummien antamat leveydet eri katkaisuepäilyksille d_{\max} . Kuvaan on vertailun vuoksi piirretty myös MC-simulaatioilla suoraan laskettu leveys. Kuvasta nähdään, että vaikkakin osasummat antavat yl-



Kuva 10. Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveys otospituudella $L = 512$ verrattuna lausekkeen (5.7) osasummiin, jossa summauksen ylärajana on d_{\max} . Korrelaattoreina osasummissa on käytetty MC-simulaatioista saatuja korrelaattoreita. Pieneen kuvaan on piirretty suurennos kuvaan merkitystä alueesta leveyden minimin lähellä. Kuten kuvasta nähdään, osasumat antavat leveyden hyvin suurille p , mutta esimerkiksi leveyden minimin paikan määrittämisessä ei riitä valita leveyden lausekkeesta (5.7) vain muutama ensimmäinen termi. Leveyden minimin ja muiden pienen p :n ilmiöiden kannalta hyvin pitkän kantaman korrelaatiot ovat siis oleellisia.

lättävän hyvän arvion leveydelle suuren p :n rajalla, pienen p :n rajalla edes hyvin suuri määrä termejä ei riitä määrittämään leveyttä tarpeeksi tarkasti esimerkiksi leveyden minimin ratkaisemiseksi.

Askelkorrelaattorien tarkempaa analyysiä varten myös TwinBCSOS-mallin korrelaattoreita laskettiin symbolisesti. Tässä vaiheessa tutkimus kuitenkin rajoitettiin vain fermioniseen ohituskieltoon, joka leveyden ei-monotonisen käyttäytymisen vuoksi on kahdesta ohituskieltoyypistä mielenkiintoisempi. Myös tässä tapauksessa kappaleessa 4.2 esitelty tekniikka toimii, eli korrelaattorin laskeminen voidaan palauttaa äärelliseen polkujen yli summaukseen ehdollistamalla korrelaattorin antava odotusarvo $\mathbb{E}(\Delta_i \Delta_{i+d})$ kävelijöiden etäisyydellä hetkellä i . Jälleen jos kävelijät ovat tarpeeksi kaukana toisistaan hetkellä i , ne käyttäytyvät hetkeen $i + d$ asti kuin vapaat kävelijät, ja siten korrelaattorin laskemiseksi riittää summata vain äärellinen määrä polkuja. Lauseke (4.1) toimii siis sellaisenaan myös TwinBCSOS-mallin korrelaattorin tapauksessa, mutta nyt lausekkeessa esiintyvä stationaarinen jakauma $\pi(x)$ on fermioniselle TwinBCSOS-mallille laskettu kävelijöiden välisen etäisyyden stationaarinen jakauma (3.5).

Koska kävelijöitä on nyt yhden sijasta kaksi, korrelaattorin määräävään summaan (4.1) laskettavien polkujen lukumäärä kasvaa d :n mukana likimain $\sim 4^d$ aikaisemman $\sim 2^d$ sijaan. Koska korrelaattorin laskeminen on siten oleellisesti aikaisempaa vaativampaa, TwinBCSOS-mallin korrelaattoreita ei laskettu kuin etäisyydelle $d = 13$ asti. Saadut lausekkeet löytyvät liitteestä C. Myös TwinBCSOS-mallin korrelaattoreille luonnolliseksi muuttujaksi osoittautui $r := 2p - 1$, jonka avulla lausuttuna korrelaattoreille löytyi rajoitetulle BCSOS-kävelijälle saatuja tuloksia muistuttava esitysmuoto. Tämä esitysmuoto koostuu yhteisestä tekijästä muotoa $-r \cdot K^d$, missä $K := \frac{1-r}{3+r}$, rationaalikertoimesta muotoa 2^{-n} sekä kokonaislukukertoimisesta r :n polynomista astetta $2d - 3$. Vaikka korrelaattoreista löydetyt polynomit eivät ole samat kuin rajoitetulle BCSOS-kävelijälle saadut, molempien mallien askelkorrelaattoreille löydetyt muodot ovat selkeästi samankaltaiset. Huomattavaa on myös, että korrelaattoreissa esiintyvä rationaalitekijä $K = (1 - p)/(1 + p)$ on täsmälleen todennäköisyys, jolla toisissaan kiinni olevat kävelijät ottavat askeleen toisistaan erilleen. Rajoitetun kävelijän korrelaattoreissa vastaava tekijä ei löytynyt, mutta toisaalta rajoitetun kävelijän tapauksessa todennäköisyys ottaa seinän vieressä askel seinästä pois päin on 1. Lisäksi fermionisen TwinBCSOS-mallin korrelaattorissa $\phi(d, r)$ esiintyvä rationaalitekijä muotoa 2^{-n} on tapausta $d = 1$ lukuun ottamatta aina tasan kaksi kertaa niin suuri kuin rajoitetun kävelijän korrelaattorissa $\theta(2d - 1, r)$ esiintyvä vastaava rationaalitekijä.

Rajoitetun BCSOS-kävelyn ja fermionisen TwinBCSOS-mallin samankaltaisuus on nähtävissä myös vertaamalla niiden korrelaattorien polynomiosien nollakohtien kompleksitasoon muodostamia pistejoukkoja. Fermioniselle mallille nämä pistejoukot on piirretty liitteen E kuvaan 15. Aikaisemman tavoin nollakohdat pakkautuvat d :n kasvaessa C :n muotoisiksi kaariksi, jotka ovat lisäksi hyvin saman näköisiä kuin rajoitetun BCSOS-kävelijän tapauksessa. Kaikkialta pilkistävät kvalitatiiviset samankaltaisuudet rajoitetun BCSOS-kävelijän mallin

ja TwinBCSOS-mallin välillä antavatkin toivoa jonkin yhtenäisen, molempien mallien ominaisuuksia selittävän teorian olemassaolosta.

Symbolisesti laskettujen korrelaattorien hyödyntämisessä ensimmäinen askel oli tutkia mallin suuren p :n rajaa tarkastelemalla korrelaattorien sarjakehitelmiä pisteen $p = 1$ ympärillä. Aikaisempien tulosten perusteella on odotettavissa, että suuren d :n korrelaattorien merkitys heikkenee p :n kasvaessa ja kävelijöiden kohdatessa toisensa yhä useammin. Tämän vuoksi juuri suuren p :n rajan katsottiin olevan hyvä lähtökohta TwinBCSOS-mallin ominaisuuksien määrittämiseen alkupään korrelaattorien avulla. Päätelmä osoittautui oikeaksi, sillä melko yllättäen pitkän kantaman korrelaatioiden merkityksen heikkeneminen näkyy hyvin konkreettisella tavalla korrelaattorien sarjakehitelmissä. Symbolisen laskennan avulla määritettyjen korrelaattorien perusteella nimittäin

$$\phi(d, p) = \mathcal{O}\left((1 - p)^d\right), \quad (5.14)$$

eli kun korrelaattori $\phi(d, p)$ esitetään muuttujan $q := 1 - p$ avulla ja kehitetään sarjaksi pisteen $q = 0$ ympärillä, sarjakehitelmän ensimmäinen nolasta eroava termi on kertalukua d .

Korrelaattorien sarjakehitelmistä löydetyn relaation (5.14) nojalla siis esimerkiksi ensimmäisen kertaluvun approksimaatio leveydelle pisteen $p = 1$ ympärillä saadaan helposti vain tarkastelemalla korrelaattoria $\phi(1, p)$, sillä muut korrelaattorit ovat korkeampaa kertalukua. Ensimmäinen korrelaattori $\phi(1, q) = -\frac{q}{2} + \mathcal{O}(q^2)$, ja symbolisesti laskettujen korrelaattorien perusteella $\phi(d, q) = \mathcal{O}(q^d)$ kun $d \geq 2$. Näin ollen kunhan (5.14) pätee myös korrelaattoreille suuremmilla d kuin mitä symbolisen laskennan avulla määritettiin, TwinBCSOS-mallin leveys

$$\begin{aligned} \frac{W^2}{L} \stackrel{(5.7)}{=} &= \frac{1}{6} - \frac{1}{6L^2} + \frac{1}{3L^3} \sum_{d=1}^{L-2} (L-d) \left((L-d)^2 - 1 \right) \phi(d) = \\ &= \frac{1}{6} - \frac{1}{6L^2} + \frac{1}{3L^3} (L-1) \left((L-1)^2 - 1 \right) \left(-\frac{q}{2} \right) + \mathcal{O}(q^2) = \\ &= \frac{1}{6} (1 - q) + \mathcal{O}(L^{-1}, q^2). \end{aligned}$$

Symbolisen laskennan tulokset siis vahvistavat simulaatioista nähdyn suuren L :n rajan käyttäytymisen, jossa skaalattu leveys pakkautuu suoralle $W^2/L = p/6$ aloittaen suuren p :n päästä (ks. kuva 6a). Tämä tulos ei kuitenkaan vielä selitä miksi skaalattu leveys pakkautuu suoralle $p/6$ hyvin tarkasti myös pienen p :n rajalla.

Symbolisen laskennan tulosten avulla pyrittiin myös TwinBCSOS-mallin tapauksessa johtamaan yleinen lauseke askelkorrelaattoreille $\phi(d, p)$. Yrityksistä huolimatta mitään rajoitetulle BCSOS-kävelijälle saadun tuloksen (5.11) kaltaista lauseketta ei korrelaattoreista kuitenkaan löydetty, vaikka mallien korrelaattorien välillä selviä yhtäläisyyksiä onkin. Jotain systematiikkaa tuloksista kuitenkin lopulta löydettiin. Tuloksen (5.14) innoittamana korrelaattoreiden muuttujan

$q = 1 - p$ avulla ilmoitettuja sarjakehitelmiä tutkittiin edelleen, ja osoittautui, että näiden kehittelmien d :n potensseilla painotetut summat käyttäytyvät systemaattisesti, joskaan systematiikka ei ole kovin ilmeinen.

Korrelaattorien d :n potensseilla painotettuja summia päädyttiin tutkimaan siitä syystä, että ne itse asiassa riittävät leveyden ratkaisemiseen. Kertomalla auki lausekkeen (5.7) summattava nähdään, että korrelaattorien kontribuutio leveyden lausekkeeseen sisältyy itse asiassa vain summiin muotoa

$$\sum_{d=1}^n d^k \phi(d) =: \Phi_n^{(k)}, \quad \text{missä } k \in \{0, 1, 2, 3\}, \quad (5.15)$$

joiden avulla lausuttuna leveys on

$$\begin{aligned} \frac{W^2}{L} = & \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{3} \Phi_{L-2}^{(0)} \right) + \left(-\Phi_{L-2}^{(1)} \right) \cdot L^{-1} + \left(-\frac{1}{6} - \frac{1}{3} \Phi_{L-2}^{(0)} + \Phi_{L-2}^{(2)} \right) \cdot L^{-2} + \\ & + \left(\frac{1}{3} \Phi_{L-2}^{(1)} - \frac{1}{3} \Phi_{L-2}^{(3)} \right) \cdot L^{-3}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Näin ollen vaikka tämänkaltaiset summat eivät muuten vaikuta oleellisilta tutkiskukohteilta, niiden määrittäminen on leveyden kannalta riittävää. Lisäksi niin kauan kun askelten väliset korrelaatiot kuolevat tarpeeksi nopeasti d :n kasvaessa – kuten näyttää tapahtuvan – summat $\Phi_{L-2}^{(k)}$ eivät tuo leveyteen mitään suoraan otospituuteen L verrannollista kontribuutiota, ja siten näiden summien avulla leveydelle saadaan mielekäs kehitemä L^{-1} :n eri kertaluvuissa arvioimalla suuren L :n rajalla $\Phi_{L-2}^{(k)} \approx \Phi_{\infty}^{(k)}$. Erityisesti esimerkiksi tällaiseen kertaluvun L^{-1} approksimaatioon riittää tuntea summat $\Phi_n^{(0)}$ ja $\Phi_n^{(1)}$, eli jo muutaman ensimmäisen summan tuntemisesta on hyötyä.

Ainoa suuren L :n rajalla merkittävä kontribuutio skaalattuun leveyteen tulee ensimmäisestä summasta $\Phi_n^{(0)}$. Simulaatioiden perusteella aina kun $p > 0$, $W^2/L \rightarrow p/6$ kun $L \rightarrow \infty$, joten suuren n :n rajalla pitäisi olla $\Phi_n^{(0)} \approx -q/2$, missä jälleen $q := 1 - p$. Aikaisemman perusteella tiedetään jo, että $-q/2$ on ainoa kertaluvun $\mathcal{O}(q)$ termi summassa $\Phi_n^{(0)}$, joten korkeampien kertalukujen termien tulee jollain tavalla hävitä summasta rajalla $n \rightarrow \infty$. Symbolisesti laskettuja korrelaattoreita tarkastelemalla osoittautui, että itse asiassa eri korrelaattorien korkeamman kertaluvun termit kumoavat toisensa täsmälleen, eli esimerkiksi korrelaattorien $\phi(1)$ ja $\phi(2)$ kertaluvun $\mathcal{O}(q^3)$ termit kumoavat yhdessä korrelaattorien $\phi(3)$ kertaluvun $\mathcal{O}(q^3)$ termin. Yleisesti siis symbolisesti laskettujen korrelaattorien perusteella

$$\Phi_n^{(0)} = -\frac{q}{2} + \mathcal{O}(q^{n+1}). \quad (5.17)$$

Yhtälöön merkittyjä korkeamman kertaluvun termejä ei kuitenkaan ole syytä unohtaa, sillä ne eivät missään nimessä ole edes hyvin suuren n :n rajalla merkityksellömän pieniä – rajalla $q = 1/2$ kaikki korrelaatiot ovat nollia, ja siten

$\Phi_n^{(0)}(q = 1/2) = 0$ kaikille n . Itse asiassa korkeamman kertaluvun termien kertoimet näyttävät kasvavan hyvin suuriksi. Symbolisesti laskettujen korrelaattorien perusteella esimerkiksi

$$\Phi_{12}^{(0)} = -\frac{q}{2} + \frac{1493303293}{8192}q^{13} + \mathcal{O}(q^{14}).$$

Juuri nämä korkeamman kertaluvun termit vievät korrelaatioiden summan rajalla $q = 1/2$ nolleen, ja ne myös kääntävät aluksi q :n kasvaessa lineaarisesti laskevan leveyden jyrkästi takaisin vapaan kävelijän leveyteen. Kun $q < 1/2$, ensimmäisen korrelaatiotsumman sarjaesitys (5.17) kuitenkin selittää leveyden käyttäytymisen $W^2/L \rightarrow p/6$ rajalla $L \rightarrow \infty$.

Jotta leveyden lausekkeeseen (5.16) saataisiin jokin äärellisen L :n korjaus, ryhdyttiin seuraavaksi tarkastelemaan korrelaatioiden painotettua summaa $\Phi_n^{(1)}$. Tässä tapauksessa korkeamman kertaluvun termit eivät kumoa toisiaan, mutta jo ensimmäisestä tarkastelusta nähtiin, että q :n suhteen sarjaksi kehitettynä eri kertalukujen kertoimet kasvavat säännönmukaisesti. Hieman lähemmällä tarkastelulla osoittautui, että kertoimet ovat kertalukuun n asti itse asiassa varsin yksinkertaista muotoa, ja koko sarja voidaan esittää muodossa

$$\Phi_n^{(1)} = -\frac{q}{2} + \frac{1}{16} \sum_{k=1}^n (k+1) \cdot (2q)^k + \mathcal{O}(q^{n+1}). \quad (5.18)$$

Seuraavan summan $\Phi_n^{(2)}$ kertoimien systematiikan selvittäminen oli hieman suuremman työn takana. Lopulta kuitenkin myös tälle summalle löydettiin hieman edellistä muistuttava esitys

$$\Phi_n^{(2)} = -\frac{q}{2} + \frac{1}{32} \sum_{k=1}^n a(k-2) \cdot (2q)^k + \mathcal{O}(q^{n+1}), \quad (5.19)$$

missä polynomi $a(k) := 18 + \frac{k}{3}(44 + 12k + k^2)$. Neljännen summan $\Phi_n^{(3)}$ kohdalla kertoimiin kokeiltiin suoraan edellisten kaltaista polynomimuotoista yritettä, ja siten saatiin nopeasti selville, että

$$\Phi_n^{(3)} = -\frac{q}{2} + \frac{1}{256} \sum_{k=1}^n b(k-2) \cdot (2q)^k + \mathcal{O}(q^{n+1}), \quad (5.20)$$

missä polynomi $b(k) := 336 + \frac{k}{4}(1786 + 911k + 221k^2 + 25k^3 + k^4)$. Kaikille leveyden laskemiseen tarvittaville korrelaattorisummille on siis nyt määritetty approksimaatiot, joiden tulisi olla melko tarkkoja erityisesti suuren p :n (eli pienen q :n) rajalla.

Saaduista esityksistä (5.17)–(5.20) laskettiin approksimaation johtamiseksi leveydelle seuraavaksi raja $n \rightarrow \infty$, eli määritettiin lausekkeissa esiintyvien polynomikertoimien $(k+1)$, $a(k)$ ja $b(k)$ generoivat funktiot. Yksinkertaisimmat

esitykset tuloksille saatiin jo aiemmin käytetyn muuttujan $r := 2p - 1$ avulla, ja nämä esitykset, jotka laskujen⁶ pitkäkkäisyyden vuoksi esitetään tässä ilman välivaiheita, ovat

$$\Phi_{\infty}^{(0)} = \frac{r-1}{4}, \quad (5.21)$$

$$\Phi_{\infty}^{(1)} = \frac{(r-1)(2r^2+r+1)}{16r^2}, \quad (5.22)$$

$$\Phi_{\infty}^{(2)} = \frac{(r-1)(r+1)(r^3+r^2+2)}{32r^4}, \quad (5.23)$$

$$\Phi_{\infty}^{(3)} = \frac{(1-r)(2r^6-2r^5-2r^4-3r^3+3r^2-15r-15)}{128r^6}. \quad (5.24)$$

Sijoittamalla nyt korrelaattorisummien suuren L :n rajat (5.21)–(5.24) leveyden lausekkeeseen (5.16) saadaan toivottavasti ainakin suuren L :n rajalla hyvin toimiva approksimaatio TwinBCSOS-mallin leveydelle. Lisäksi lausekkeesta (5.16) voidaan ottaa mukaan vain esimerkiksi termit kertalukuun L^{-1} tai L^{-2} asti, jolloin leveydelle saadaan yksinkertaisempaa muotoa olevat approksimaatiot, jotka silti toivottavasti toimivat hyvin suuren L :n rajalla. Kuvaan 11 on piirretty nämä eri kertaluvun approksimaatiot juuri pienen p :n rajalla, jossa korrelaattorisummien approksimointi äärettömällä summalla (5.21)–(5.24) ennen pitkää pettää. Kuten kuvasta nähdään, vaikka myös kaikki termit sisältävä kolmannen kertaluvun approksimaatio erkanee lopulta MC-simulaatioilla lasketusta leveydestä, L :n kasvaessa approksimaatiot noudattelevat simulaatioista saatua leveyttä yhä pienemmille p saakka. Erityisesti suuren L :n rajalla jo ensimmäisen kertaluvun approksimaatio noudattelee leveyttä niin hyvin, että approksimaatioiden avulla voidaan tutkia fermionisen TwinBCSOS-mallin mielenkiintoisinta ominaisuutta eli leveyden minimiä ja sen paikkaan liittyvää skaalausta.

Kuvan 11 perusteella leveyden minimin skaalausta voidaan etsiä jo leveyden kertaluvun $\mathcal{O}(L^{-1})$ approksimaatiosta

$$\frac{W^2}{L} = \frac{1}{6} + \frac{r-1}{12} - \frac{(r-1)(2r^2+r+1)}{16Lr^2} + \mathcal{O}(L^{-2}).$$

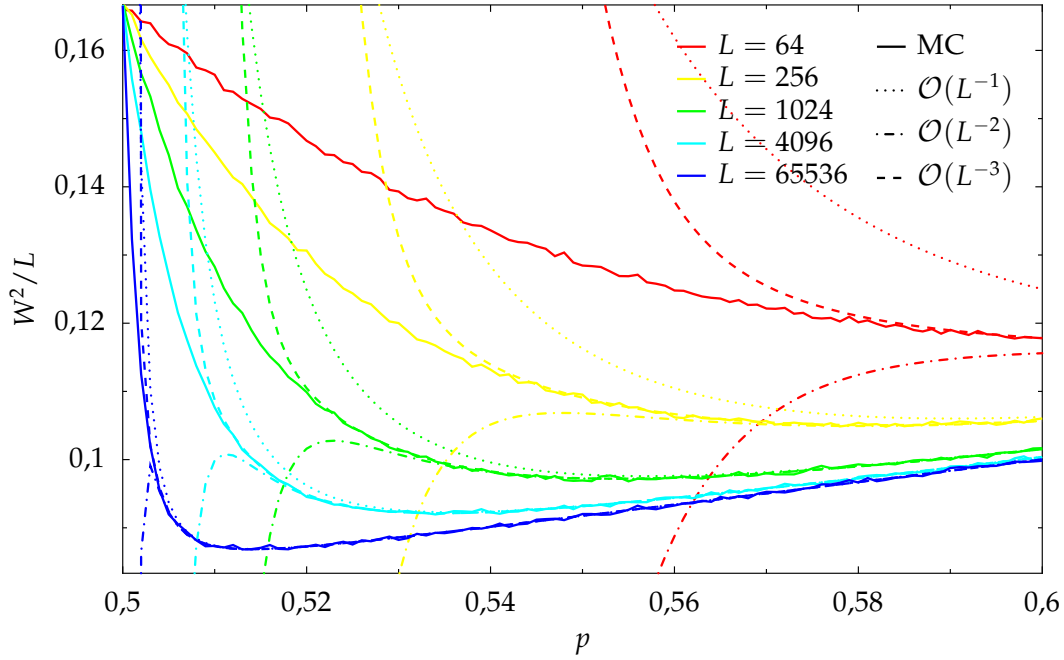
⁶Mikä tahansa sarja muotoa $\sum_{k=0}^{\infty} p(k) z^k$, missä $p(k)$ on polynomi, voidaan helposti laskea geometrisen sarjan $\sum_{k=0}^{\infty} z^k = (1-z)^{-1}$ avulla. Derivoimalla yhtälön molempia puolia n kertaa saadaan

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k+n)!}{k!} z^k = n!(1-z)^{-(n+1)}.$$

Sarjan $\sum_{k=0}^{\infty} p(k) z^k$ ratkaisemiseksi riittää siis esittää polynomi $p(k)$ summana termejä muotoa $a_n p_{(n)}(k)$, missä polynomit $p_{(n)}(k) = \frac{(k+n)!}{k!}$. Edellisen nojalla nyt

$$\sum_{k=0}^{\infty} p(k) z^k = \sum_{n=0}^{\deg p(k)} \frac{a_n \cdot n!}{(1-z)^{n+1}},$$

missä $\deg p(k)$ on polynomin $p(k)$ aste.



Kuva 11. Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveydelle lausekkeesta (5.16) saadut approksimaatiot, joissa korrelaattorisummaa $\Phi_{L-2}^{(k)}$ on arvioitu lausekkeista (5.21)–(5.24) saaduilla raja-arvoillaan. Varsinainen kertaluvun $\mathcal{O}(L^{-3})$ approksimaatio, korkeamman kertaluvun termit pois jättämällä saadut kertalukujen $\mathcal{O}(L^{-1})$ ja $\mathcal{O}(L^{-2})$ approksimaatiot sekä MC-simulaatioista saatu leveys on kullekin otospituudelle L piirretty kuvaan erilaisilla viivatyypeillä. Kuvasta on jätetty pois suuren p :n alue, jossa approksimaatiot odotetusti toimivat erinomaisesti.

Suoraan derivaatan nollakohdasta ratkaisemalla saadaan leveyden minimoivan parametrin arvoksi

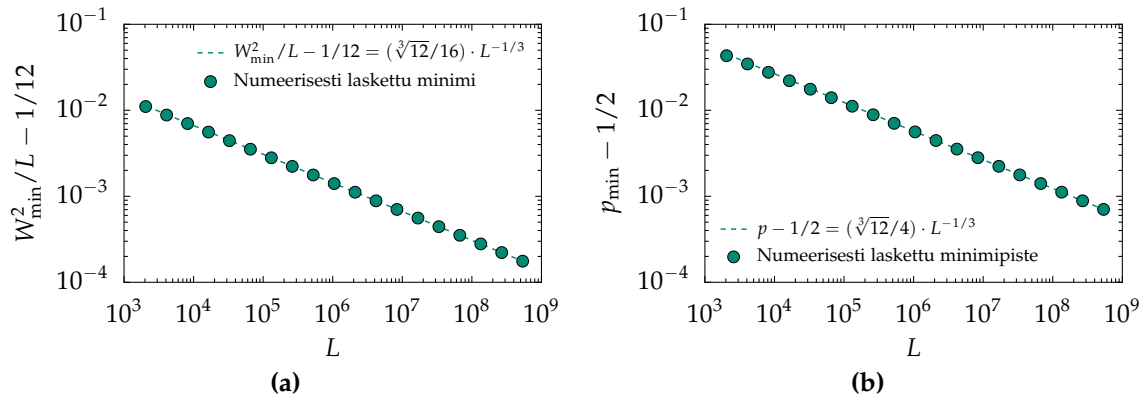
$$r_{\min} = \sqrt[3]{\frac{3}{2L-3}} \quad \text{eli} \quad p_{\min} = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt[3]{12}}{4} \left(L - \frac{3}{2}\right)^{-1/3} \sim \frac{1}{2} + \frac{\sqrt[3]{12}}{4} L^{-1/3}. \quad (5.25)$$

Leveyden minimiarvon asymptoottiseksi käyttäytymiseksi puolestaan saadaan

$$\frac{W_{\min}^2}{L} \sim \frac{1}{12} + \frac{\sqrt[3]{12}}{16} L^{-1/3}. \quad (5.26)$$

Ensimmäisen kertaluvun approksimaatiosta saatu skaalauseksponentti leveyden minimille on siis jo MC-simulaatioiden perusteella ennustettu $-1/3$. Myös potenssilaeissa esiintyvät kertoimet $\sqrt[3]{12}/4 \approx 0,572$ ja $\sqrt[3]{12}/16 \approx 0,143$ ovat lähellä MC-simulaatiodataan tehdyistä sovituksista saatuja kertoimia 0,47 ja 0,13.

Tarkistuksen vuoksi minimiarvo laskettiin numeerisesti myös kertaluvun $\mathcal{O}(L^{-3})$ approksimaatiosta ja tuloksia verrattiin edellä saatuihin tuloksiin. Kuvat eri tavoin määritettyjen minimien käyttäytymisestä on piirretty kuvasarjaan 12.



Kuva 12. Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveydelle lausekkeesta (5.16) saadusta approksimaatiosta numeerisesti laskettu leveyden minimi (a) ja sitä vastaava parametri (b) verrattuna ensimmäisen kertaluvun approksimaatiosta saatuihin tuloksiin (5.26) ja (5.25).

Kuten kuvasta nähdään, ensimmäisen ja kolmannen kertaluvun approksimaatiot antavat suuren L :n rajalla saman leveyden minimin ja täsmälleen saman skaalauksen.

6 Johtopäätökset

Statistisen fysiikan ongelmat ovat usein helppoja muotoilla mutta vaikeita ratkaista. Näin kävi myös tämän tutkimuksen pääkohteina olleiden rajoitetun BCSOS-kävelijän ja TwinBCSOS-mallin kohdalla, sillä mallien yksinkertaisuuden taakse osoittautui piiloutuvan varsin monimutkaista käyttäytymistä. Haasteellisesta lähtökohdasta huolimatta tutkimuksen tavoitteena olleiden mallien leveyksien käyttäytyminen selvitettiin tarkasti, ja tuloksena saatiin jopa eksakti lauseke rajoitetun BCSOS-kävelijän leveydelle, sekä eksaktit skaalauseksponentit fermionisen TwinBCSOS-mallin leveyden minimin käyttäytymiselle. Näitä kahta voidaankin pitää tämän tutkimuksen päätuloksina. Mallien käyttäytymisestä löytynyttä monimutkaisuutta voi lisäksi sellaisenaan pitää positiivisena tuloksena tutkimuksen perimmäisen tarkoituksen kannalta, sillä tämä antaa toivoa siitä, että nämä yksinkertaiset satunnaiskävelijämallit todella tavoittavat jotain vuorovaikuttavien rajapintojen ilmiömaailmasta. Mielenkiintoisin tämän tutkimuksen avoimeksi jättämä kysymys – ja samalla myös erinomainen lähtökohta laajemmille jatkotutkimuksille – onkin, voidaanko rajoitetulle BCSOS-kävelijälle ja TwinBCSOS-mallille saatu käyttäytyminen nähdä myös joissain samankaltaisissa, aikakehityksen sisältävissä malleissa. Ihannetapauksessa rajoitetun BCSOS-kävelyn sekä TwinBCSOS-mallin korrelaattoreissa nähdyt samankaltaisuudet heijastavat jotain fundamentaalia, risteämättömien rajapintojen malleille yleistä, biasoidun diffuusion ja kovan repulsion keskinäisestä kamppailusta syntyvää dynamiikkaa.

Tuloksien lisäksi tässä vaiheessa on syytä kiinnittää huomiota myös käytettyihin menetelmiin. Koska tämä työ on liikkunut jo lähtökohdiltaan alueella, jossa ei ole varsinaisia joka tilanteeseen sopivia perustyökaluja – pois lukien Monte Carlo – monet käytetyistä menetelmistä ovat ”kotitekoisia” ja juuri käsillä olevia ongelmia varten löydettyjä. Jo leveyden tarkastelu korrelaattorien kautta on tietävästi täysin uusi menetelmä tämän suureen määrittämiseen, vaikka leveyden palauttaminen askelkorrelaattoriin onkin melko suoraviivaista. Lisäksi erityisesti symbolinen laskenta ja yleisten lainalaisuuksien päättely eksakteista lausekkeista ovat melko epätavallisia työvälineitä fysiikassa. Kävelijöiden korrelaatiofunktioiden määrittämiseen tämä kuitenkin soveltui erityisen hyvin, sillä symbolisesti laskettuja eksakteja tuloksia on helposti saatavilla, ja korrelaattoreilla on selkeä, aikaetäisyyden d antama hierarkia. Lisäksi kävelijöiden tapauksessa korrelaattoreissa ei ole syytä olettaa tapahtuvan oleellisia muutoksia millään suurilla d , jolloin korrelaattorien laskeminen muutamilla ensimmäisillä d on perusteltu keino arvioida korrelaattorien yleistä käyttäytymistä. Toinen, edelliseen liittyvä erikoinen menetelmä oli korrelaattorien hahmottaminen piirtämällä niiden nollakohdat kompleksitasoon ja niiden välisten yhteyksien tutkiminen muodostuvien pistejoukkojen kautta. Tämän menetelmän täyttä potentiaalia ei kuitenkaan vielä välttämättä ole valjastettu, ja jatkotutkimusten kautta olisikin esimerkiksi erittäin kiinnostavaa tietää, onko rajoitetun BCSOS-kävelijän ja TwinBCSOS-mallin korrelaattorien nollakohtakuvaajien samankaltaisuus jokin yleinen risteämättömyyseh-

dosta seuraava ominaisuus, jonkin näiden kahden mallin välisen vastaavuuden seuraus vai silkkaa sattumaa. Alustavien tutkimusten perusteella vaikuttaa siltä, että pienet muutokset kävelijöiden siirtymätodennäköisyyksiin aiheuttavat nollakohtakuvaajiin monimutkaista hienorakennetta, mutta Catalanin polynomeille ominaiset C-kaaret säilyvät kuvioissa samankaltaisina.

Toinen tämän tutkimuksen ehdottomista päätuloksista on rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorin eksakti lauseke (5.11). Koska tämä tulos on kuitenkin vain symbolisesti lasketuista tuloksista nähty lainalaisuus, tuloksesta on vielä pitkä matka heijastavan seinän BCSOS-kävelijälle aiheuttaminen korrelaatioiden *ymmärtämiseen*. Korrelaattorin lausekkeessa esiintyvien kertoimien kautta päädyttiin ”löytämään uudelleen” tunnettu kombinatorinen tulos, Catalanin kolmio, joka esiteltiin kappaleessa 5.1. Catalanin kolmiolla on selkeä tulkinta rajoitetun BCSOS-kävelijän tietyntyyppisten polkujen lukumääränä, joten saatu eksakti lauseke voidaan todennäköisimmin johtaa kombinatorisesti. Tähän liittyy kuitenkin erikoinen huomio saadusta lausekkeesta (5.11) – lausekkeessa esiintyy termejä muotoa $c_{nk}p^n(1-p)^k$, ja Catalanin kolmion kerroin c_{nk} kuvaa niiden nollassa lähtevien rajoitettujen polkujen lukumäärää, joissa on n askelta ylös ja k alas. Kuitenkin tätä tekijää kertoo sellaisen polun todennäköisyys, jossa on n askelta alas ja k ylös! Eksakti kombinatorinen ratkaisu rajoitetun BCSOS-kävelyn askelkorrelaattorille saattaa hyvinkin olla jo olemassa, mutta sen löytäminen käy jo omanlaisestaan tutkimuksesta. Rajoitetun BCSOS-kävelyn polkujen laskemisen kaltaiset yksinkertaiset kombinatoriset ongelmat voivat esiintyä lukemattomissa eri muodoissa, eikä ratkaisun yhteydessä siis välttämättä mainita sanallakaan satunnaiskävelyjä, rajapintoja, seiniä tai mitään muutakaan ilmeistä sovellusta. Ehkä akuutein jatkotutkimuksen tarve liittyy joka tapauksessa tässä tutkimuksessa konjektuurinomaisesti esitetyn rajoitetun BCSOS-kävelijän korrelaattorin analyttiseen ratkaisuun. Samalla mahdollisesti löydettäisiin selitys rajoitetun BCSOS-kävelijän korrelaattorin erikoiseen riippuvuuteen d :n pariteetista. Mikäli jatkotutkimuksissa rajoitetun BCSOS-kävelijän korrelaattorin lauseke onnistutaan selittämään, samalla luultavasti edistytään myös huomattavasti rajoitetun BCSOS-kävelijän ja TwinBCSOS-mallin välisten yhteyksien ymmärtämisessä.

Toinen tutkimuksen päätuloksista, fermionisen TwinBCSOS-mallin leveyden minimin skaalaus $\sim L^{-1/3}$, tarjoaa myös mahdollisuuden jatkotutkimuksiin. Ensimmäinen tutkimuskohde on luonnollisesti pyrkiä selittämään tämä skaalauseksponentti suoraan mallin ominaisuuksista käsin. Lisäksi tämänkaltaisiin ilmiöihin usein liittyvän universaalisuuden ansiosta samanlainen skaalausrelaatio saattaa löytyä myös muista vastaavanlaisista kahden risteämättömän rajapinnan malleista. Mikäli näin käy, eli mikäli saatu skaalausrelaatio ei ole liian herkkä mallin yksityiskohdille, samanlainen skaalaus voidaan ehkä havaita kokeellisestikin. Tämä voi kuitenkin olla vaikeaa, sillä edes riittävän lähellä TwinBCSOS-mallin tilannetta olevan koejärjestelyn toteuttaminen voi olla hyvinkin hankalaa.

Viitteet

- [1] W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications* osa 1, 3. laitos. Wiley (1968).
- [2] G. R. Grimmett ja D. R. Stirzaker. *Probability and random processes*, 2. laitos. Oxford University Press (1992).
- [3] C. W. Gardiner. *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, 2. laitos. Springer-Verlag (1985).
- [4] C. Geiss ja S. Geiss. An introduction to probability theory (2006). <http://www.math.jyu.fi/~geiss/scripts/introduction-probability.pdf>. Luentomoniste.
- [5] P. Brémaud. *Markov chains, Gibbs fields, Monte Carlo simulation and queues*. Springer-Verlag (1999).
- [6] W. K. Burton, N. Cabrera ja F. C. Frank. The growth of crystals and the equilibrium structure of their surfaces. *Philos. Trans. R. Soc. London A* **243**, 299 (1951).
- [7] S. F. Edwards ja D. R. Wilkinson. The surface statistics of a granular aggregate. *Proc. R. Soc. London A* **381**, 17 (1982).
- [8] M. Kardar, G. Parisi ja Y.-C. Zhang. Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [9] A.-L. Barabási ja H. E. Stanley. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge University Press (1995).
- [10] T. Halpin-Healy ja Y.-C. Zhang. Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that. Aspects of multidisciplinary statistical mechanics. *Phys. Rep.* **254**, 215 (1995).
- [11] S. T. Chui ja J. D. Weeks. Pinning and roughening of one-dimensional models of interfaces and steps. *Phys. Rev. B* **23**, 2438 (1981).
- [12] H. van Beijeren. Exactly solvable model for the roughening transition of a crystal surface. *Phys. Rev. Lett.* **38**, 993 (1977).
- [13] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Sander ja R. C. Ball. Ballistic deposition on surfaces. *Phys. Rev. A* **34**, 5091 (1986).
- [14] J. Neergaard ja M. den Nijs. Stationary-state skewness in KPZ-type growth. *J. Phys. A* **30**, 1935 (1997).
- [15] M. E. Fisher. Walks, walls, wetting, and melting. *J. Stat. Phys* **34**, 667 (1984).
- [16] S. N. Majumdar ja M. Barma. Two-tag correlation functions in one-dimensional lattice gases. *Physica A* **177**, 366 (1991).
- [17] R. Burioni, D. Cassi, G. Giusiano ja S. Regina. Two interacting diffusing particles on low-dimensional discrete structures. arXiv:[cond-mat/0201099v1](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0201099v1) (2002).
- [18] T. Ambjörnsson, L. Lizana ja R. J. Silbey. Dynamics of two hardcore interacting

particles with different diffusion constants in one dimension. arXiv:0803.2485v1 (2008).

- [19] L. Lizana ja T. Ambjörnsson. Single-file diffusion in a box. arXiv:0801.0563v2 (2008).
- [20] G. Schehr, S. N. Majumdar, A. Comtet ja J. Randon-Furling. Exact distribution of the maximal height of watermelons. arXiv:0807.0522v1 (2008).
- [21] R. P. Stanley. *Enumerative combinatorics* osa 1. Cambridge University Press (1997).
- [22] R. P. Stanley. *Enumerative combinatorics* osa 2. Cambridge University Press (1999).
- [23] R. P. Stanley. Catalan addendum (2008). <http://www-math.mit.edu/~rstan/ec/catadd.pdf>. Teoksen *Enumerative combinatorics* liite, jossa esitellään (16.5.2008 päivättyssä versiossa) yhteensä 166 Catalanin lukuihin johtavaa kombinatorista ongelmaa.
- [24] D. F. Bailey. Counting arrangements of 1's and -1's. *Math. Mag.* **69**, 128 (1996).
- [25] B. Lindström. On the vector representations of induced matroids. *Bull. London Math. Soc.* **5**, 85 (1973).
- [26] I. M. Gessel ja X. G. Viennot. Determinants, paths, and plane partitions. *Preprint* (1989). <http://citeseer.ist.psu.edu/gessel89determinants.html>.
- [27] R. Brak, J. W. Essam ja A. L. Owczarek. From the Bethe Ansatz to the Gessel-Viennot theorem. *Ann. Comb.* **3**, 251 (1999).
- [28] R. Brak ja A. Owczarek. A combinatorial interpretation of the free-fermion condition of the six-vertex model. *J. Phys. A* **32**, 3497 (1999).
- [29] A. J. Guttmann ja M. Vöge. Lattice paths: Vicious walkers and friendly walkers. *J. Stat. Plan. Infer.* **101**, 107 (2002).
- [30] T. Feierl. The height of watermelons with wall. arXiv:0802.2691v1 (2008).
- [31] T. Feierl. The height and range of watermelons without wall. arXiv:0806.0037v1 (2008).
- [32] B. van Rensburg. Adsorbing staircase walks and staircase polygons. *Ann. Comb.* **3**, 451 (1999).
- [33] S. Majumdar ja A. Comtet. Airy distribution function: From the area under a Brownian excursion to the maximal height of fluctuating interfaces. *J. Stat. Phys.* **119**, 777 (2005).
- [34] G. Foltin, K. Oerding, Z. Rácz, R. L. Workman ja R. K. P. Zia. Width distribution for random-walk interfaces. *Phys. Rev. E* **50**, R639 (1994).
- [35] D. Friedan, Z. Qiu ja S. Shenker. Conformal invariance, unitarity, and critical exponents in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1575 (1984).
- [36] J. Juntunen, O. Pulkkinen ja J. Merikoski. Roughness of two nonintersecting one-dimensional interfaces. *Phys. Rev. E* **76**, 041607 (2007).

Kuvat

1	Yksiulotteisten rajapintojen muotoja rajoittavia ehtoja.	11
2	Lukujonon (C_n) ratkaisuun johtava rajoitettujen binääripolkujen rekursio.	26
3	MC-menetelmällä arvioitu rajoitetun BCSOS-kävelijän skaalattu leveys ajoparametrin p funktiona.	33
4	MC-menetelmällä arvioitu rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattori.	33
5	Symbolisen laskennan avulla saatu rajoitetun BCSOS-kävelijän leveys verrattuna MC-simulaatioista saatuun leveyteen.	36
6	MC-menetelmällä arvioitu TwinBCSOS-mallin leveys.	38
7	Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveyden minimin ja minimiä vastaavan ajoparametrin arvon skaalautuminen.	39
8	MC-menetelmällä arvioidut fermionisen ja bosonisen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattorit.	41
9	Fermionisen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattori verrattuna rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattoriin kun korrelaattoreista on vähennetty suuren d :n raja.	42
10	Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveys otospituudella $L = 512$ verrattuna lausekkeen (5.7) osasummiin.	43
11	Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveydelle lausekkeesta (5.16) saadut approksimaatiot	49
12	Fermionisen TwinBCSOS-mallin leveydelle lausekkeesta (5.16) saadusta approksimaatiosta numeerisesti laskettu leveyden minimi (a) ja sitä vastaava parametri (b) verrattuna ensimmäisen kertaluvun approksimaatiosta saatuihin tuloksiin (5.26) ja (5.25).	50
13	Rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorien polynomiosan nollakohdat.	59
14	Funktion $\theta(d, r) + r^2$ nollakohdat kompleksitasossa.	60
15	TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattorien polynomiosan nollakohdat.	61

Taulukot

I	Catalanin kolmio.	28
---	---------------------------	----

Liitteet

Liite A Merkintöjä

- ◇ Luonnolliset luvut $\mathbb{N} := \{0, 1, 2, 3, \dots\}$.
- ◇ Tapahtuman A todennäköisyys merkitään $\mathbb{P}(A) \in [0, 1]$.
- ◇ Tapahtuman A ehdollinen todennäköisyys ehdolla B

$$\mathbb{P}(A | B) := \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)},$$

missä oltava $\mathbb{P}(B) \neq 0$.

- ◇ Satunnaismuuttujan X odotusarvo merkitään $\mathbb{E}(X)$.
- ◇ Kompleksitason z_0 -keskinen, r -säteinen kiekko

$$D(z_0, r) := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - z_0| < r\}.$$

- ◇ Lattiafunktio

$$\lfloor x \rfloor := \max\{n \in \mathbb{Z} \mid n \geq x\}.$$

- ◇ Luvun n kertoma

$$n! := \prod_{k=1}^n k.$$

- ◇ Luvun n tuplakertoma $n!!$ määräytyy rekursiosta

$$n!! := \begin{cases} 1 & \text{kun } n \in \{0, 1\} \\ n \cdot (n-2)!! & \text{kun } n \geq 2. \end{cases}$$

Tuplakertoma toimii siis kuten kertoma, mutta kertoo keskenään vain ne luvut, jotka ovat samaa pariteettia kuin n .

Liite B Symbolisesti lasketut rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattorit

Askelkorrelaattoreita rajoitetulle BCSOS-kävelijälle. Lausekkeissa $r := 2p - 1$. Kaikille parillisille d vaikuttaa olevan $\theta(d, r) = r^2$.

$$\theta(1, r) = -r$$

$$\theta(3, r) = -r \frac{1}{2} (1 + r^2)$$

$$\theta(5, r) = -r \frac{1}{8} (3 + 6r^2 - r^4)$$

$$\theta(7, r) = -r \frac{1}{16} (5 + 15r^2 - 5r^4 + r^6)$$

$$\theta(9, r) = -r \frac{1}{128} (35 + 140r^2 - 70r^4 + 28r^6 - 5r^8)$$

$$\theta(11, r) = -r \frac{1}{256} (63 + 315r^2 - 210r^4 + 126r^6 - 45r^8 + 7r^{10})$$

$$\theta(13, r) = -r \frac{1}{1024} (231 + 1386r^2 - 1155r^4 + 924r^6 - 495r^8 + 154r^{10} - 21r^{12})$$

$$\theta(15, r) = -r \frac{1}{2048} (429 + 3003r^2 - 3003r^4 + 3003r^6 - 2145r^8 + 1001r^{10} - 273r^{12} + 33r^{14})$$

$$\theta(17, r) = -r \frac{1}{32768} (6435 + 51480r^2 - 60060r^4 + 72072r^6 - 64350r^8 + 40040r^{10} - 16380r^{12} + 3960r^{14} - 429r^{16})$$

$$\theta(19, r) = -r \frac{1}{65536} (12155 + 109395r^2 - 145860r^4 + 204204r^6 - 218790r^8 + 170170r^{10} - 92820r^{12} + 33660r^{14} - 7293r^{16} + 715r^{18})$$

$$\theta(21, r) = -r \frac{1}{262144} (46189 + 461890r^2 - 692835r^4 + 1108536r^6 - 1385670r^8 + 1293292r^{10} - 881790r^{12} + 426360r^{14} - 138567r^{16} + 27170r^{18} - 2431r^{20})$$

$$\theta(23, r) = -r \frac{1}{524288} (88179 + 969969r^2 - 1616615r^4 + 2909907r^6 - 4157010r^8 + 4526522r^{10} - 3703518r^{12} + 2238390r^{14} - 969969r^{16} + 285285r^{18} - 51051r^{20} + 4199r^{22})$$

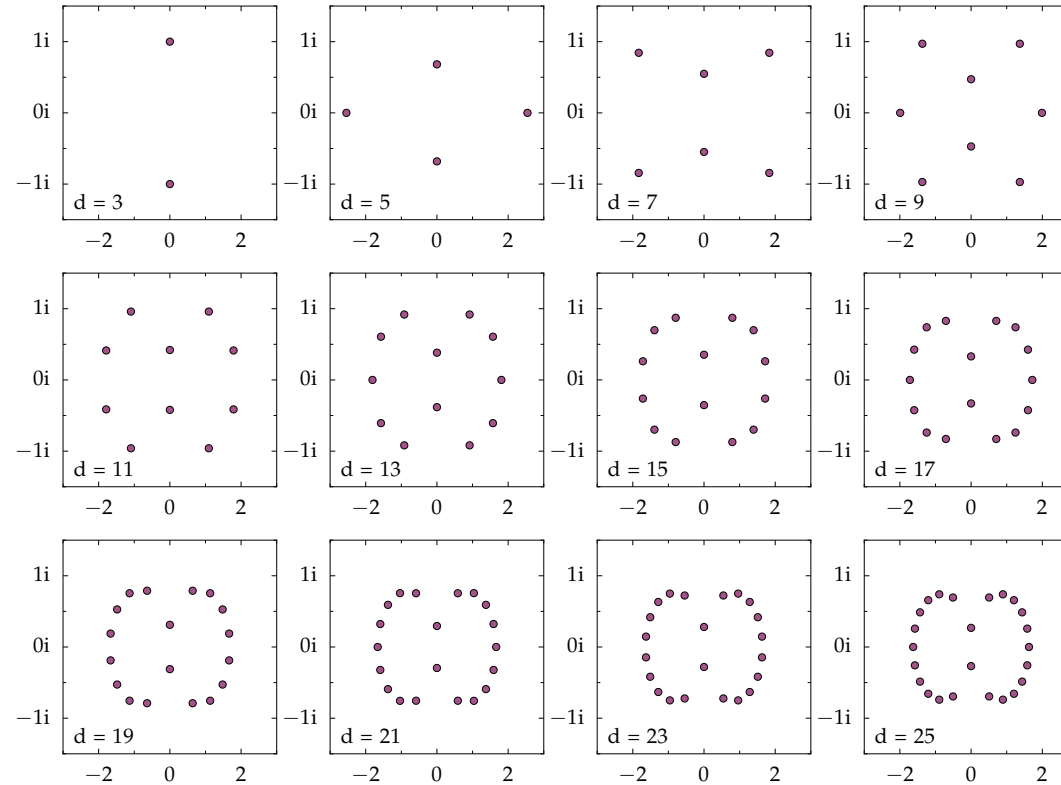
$$\theta(25, r) = -r \frac{1}{4194304} (676039 + 8112468r^2 - 14872858r^4 + 29745716r^6 - 47805615r^8 + 59491432r^{10} - 56787276r^{12} + 41186376r^{14} - 22309287r^{16} + 8748740r^{18} - 2348346r^{20} + 386308r^{22} - 29393r^{24})$$

Liite C Symbolisesti lasketut TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattorit

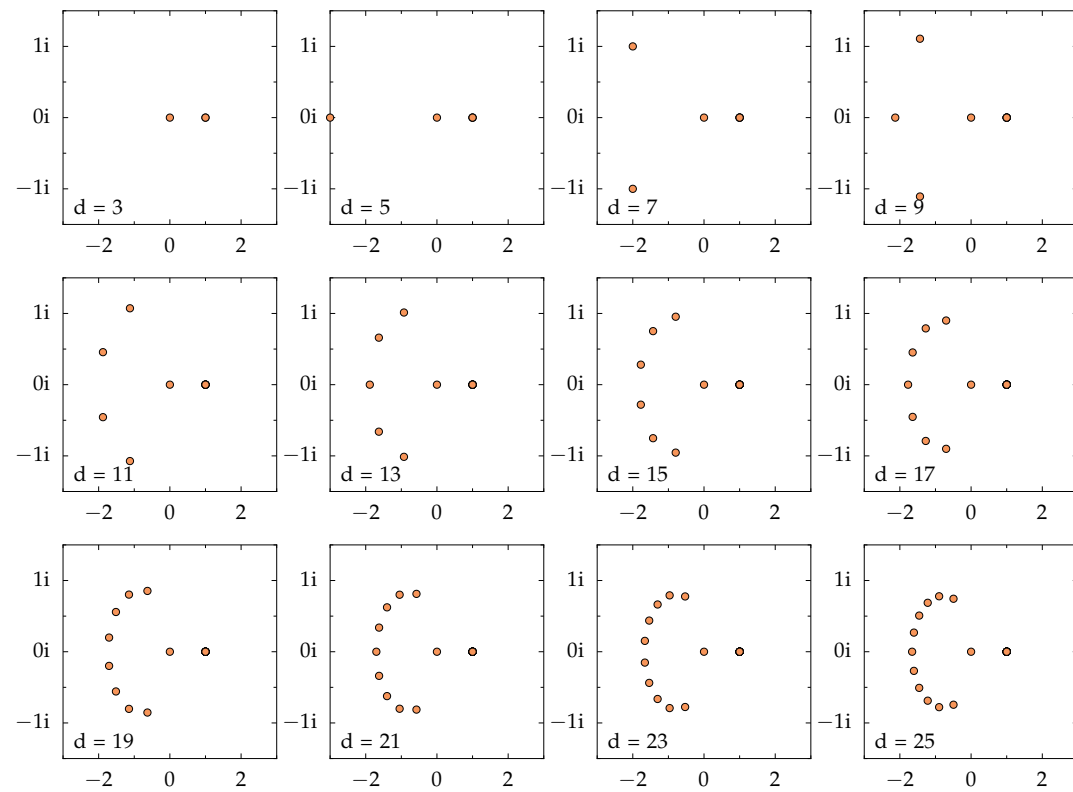
Askelkorrelaattoreita TwinBCSOS-mallille fermionisella ohituskiellolla. Lausekkeissa $r := 2p - 1$ ja $K := \frac{1-r}{r+3}$.

$$\begin{aligned}\phi(1,r) &= -r \cdot K^1 \\ \phi(2,r) &= -r \cdot K^2 \cdot (2+r) \\ \phi(3,r) &= -\frac{1}{4} \cdot r \cdot K^3 \cdot (19+23r+9r^2+r^3) \\ \phi(4,r) &= -\frac{1}{8} \cdot r \cdot K^4 \cdot (97+197r+162r^2+66r^3+13r^4+r^5) \\ \phi(5,r) &= -\frac{1}{64} \cdot r \cdot K^5 \cdot (2059+6011r+7695r^2+5535r^3+2385r^4+609r^5+85r^6+5r^7) \\ \phi(6,r) &= -\frac{1}{128} \cdot r \cdot K^6 \cdot (11191+43139r+75816r^2+79056r^3+53406r^4+24030r^5+7152r^6+1352r^7+147r^8+7r^9) \\ \phi(7,r) &= -\frac{1}{512} \cdot r \cdot K^7 \cdot (123635+596539r+1342089r^2+1845585r^3+1711206r^4+1115478r^5+518490r^6+171018r^7+39095r^8+5887r^9+525r^{10}+21r^{11}) \\ \phi(8,r) &= -\frac{1}{1024} \cdot r \cdot K^8 \cdot (690953+4022917r+11079342r^2+18999198r^3+22498155r^4+19316151r^5+12306708r^6+5865300r^7+2083695r^8+543555r^9+101022r^{10}+12654r^{11}+957r^{12}+33r^{13}) \\ \phi(9,r) &= -\frac{1}{16384} \cdot r \cdot K^9 \cdot (31164787+213209555r+696797883r^2+1435758939r^3+2075333967r^4+2218264623r^5+1803235527r^6+1130790375r^7+549711225r^8+206613145r^9+59430513r^{10}+12828753r^{11}+2009733r^{12} \\ &\quad +215589r^{13}+14157r^{14}+429r^{15}) \\ \phi(10,r) &= -\frac{1}{32768} \cdot r \cdot K^{10} \cdot (176917291+1393845047r+5283310860r^2+12739493700r^3+21789430920r^4+27935968176r^5+27693439596r^6+21607140420r^7+13393064070r^8+6616207110r^9+2599537924r^{10} \\ &\quad +806435116r^{11}+194875120r^{12}+35882440r^{13}+4859140r^{14}+455884r^{15}+26455r^{16}+715r^{17}) \\ \phi(11,r) &= -\frac{1}{131072} \cdot r \cdot K^{11} \cdot (2019745097+18038216497r+77921946135r^2+215563590495r^3+426474316620r^4+638751744972r^5+748523451060r^6+700154895924r^7+529059293334r^8+325042176294r^9 \\ &\quad +162719696106r^{10}+66268250682r^{11}+21836637196r^{12}+5765503436r^{13}+1201064436r^{14}+192816052r^{15}+22995401r^{16}+1917201r^{17}+99671r^{18}+2431r^{19}) \\ \phi(12,r) &= -\frac{1}{262144} \cdot r \cdot K^{12} \cdot (11581155119+115770963907r+562103374230r^2+1756770145110r^3+3951247399695r^4+6778428252939r^5+9179119898280r^6+10025127220968r^7+8952698381310r^8+6592989988422r^9 \\ &\quad +4022474390244r^{10}+2036330031780r^{11}+854250848822r^{12}+295740951470r^{13}+83878447848r^{14}+19271377320r^{15}+3527631731r^{16}+501993687r^{17}+53488630r^{18}+4012918r^{19}+188955r^{20}+4199r^{21}) \\ \phi(13,r) &= -\frac{1}{2097152} \cdot r \cdot K^{13} \cdot (266625601247+2952479494063r+15932028818043r^2+55565520158187r^3+140151994398585r^4+271211879439657r^5+417126660498405r^6+521540481930741r^7+538085039869494r^8 \\ &\quad +462638114212950r^9+333559878820974r^{10}+202370935398606r^{11}+103429423946706r^{12}+44484021329714r^{13}+16048176901770r^{14}+48290866575274r^{15}+1201788246139r^{16}+244343839883r^{17}+39885476007r^{18} \\ &\quad +5096833495r^{19}+490791717r^{20}+33470229r^{21}+1440257r^{22}+29393r^{23})\end{aligned}$$

Liite D Symbolisesti laskettujen rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattoreiden polynomiosan nollakohdat

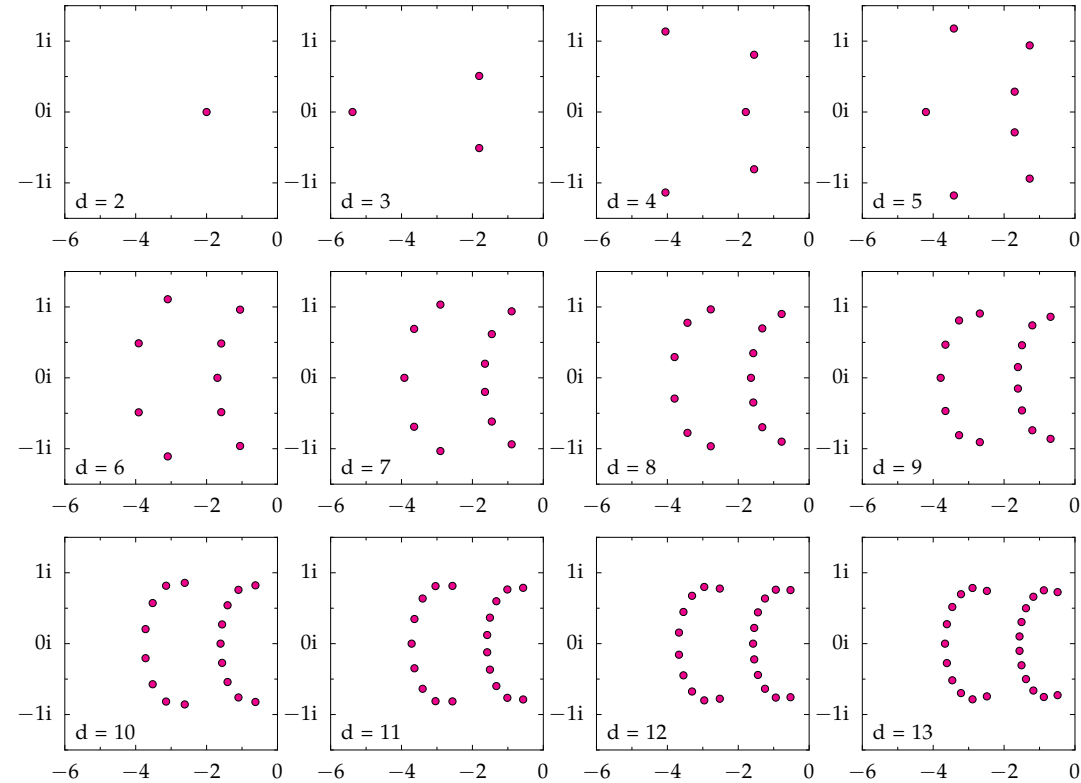


Kuva 13. Rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattoreista symbolisella laskennalla löydettyjen kokonaislukukertoimisten polynomien (ks. liite B) nollakohdat kompleksitasossa.



Kuva 14. Funktion $\theta(d, r) + r^2$ nollakohdat kompleksitasossa, missä $\theta(d, r)$ on rajoitetun BCSOS-kävelijän askelkorrelaattori ja $r = (2p - 1)$, missä p on kävelijän ajoparametri.

Liite E Symbolisesti laskettujen TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattorien polynomiosan nollakohdat kompleksitasossa



Kuva 15. TwinBCSOS-mallin askelkorrelaattoreista symbolisella laskennalla löydettyjen kokonaislukukertoimisten polynomien (ks. liite C) nollakohdat kompleksitasossa.