

Μελέτη των Self-avoiding random walks

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχολή εφαρμοσμένων Μαθηματικών και
Φυσικών επιστημών

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΡΟΥΣΣΟΣ ΙΩΣΗΦ

Επιβλέπων καθηγητής Κ. Ν. Αναγνωστόπουλος

Εισαγωγή

- Τί είναι τα self-avoiding random walks?
- Γιατί τα μελετάμε?
- Πώς θα τα μελετήσουμε?
- Τί επιδιώκουμε?

Στοιχεία Στατιστικής Φυσικής

- Περιγραφή συστημάτων με μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας $\sim 10^{44}$
- Διακριτές καταστάσεις E_μ στο σύνολο $\{\mu\}$
- $\omega_\mu(t)$: Πιθανότητα κατάληψης
- $R(\mu \rightarrow \nu)dt$: Πιθανότητες μετάβασης
- “Δεσπόζουσα” εξίσωση

$$\frac{d\omega_\mu(t)}{dt} = \sum_\nu \left\{ \omega_\nu(t) R(\nu \rightarrow \mu) - \omega_\mu(t) R(\mu \rightarrow \nu) \right\}$$

Στοιχεία Στατιστικής Φυσικής

- Προφανώς $\sum_{\mu} \omega_{\mu}(t) = 1$

- Καθώς $t \rightarrow \infty$ $\frac{d\omega_{\mu}(t)}{dt} \rightarrow 0$

άρα $p_{\mu} = \lim_{t \rightarrow \infty} \omega_{\mu}(t)$ και $\sum_{\mu} p_{\mu} = 1$

- Σε ισορροπία $p_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\mu}}$ (Boltzmann)

Στοιχεία Στατιστικής Φυσικής

- Συνάρτηση επιμερισμού: $Z(\beta) = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$
- Η μέση τιμή μιας ποσότητας Q είναι:

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} p_{\mu} Q_{\mu} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$$

- Αποδυναμώνεται ότι: $\frac{\Delta Q}{Q} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$
- Αμελητέο για τυπικά θερμοδυναμικά συστήματα αφού για $N \sim 10^{23}$ έχουμε $\Delta Q/Q \sim 10^{-11}$

Στοιχεία Στατιστικής Φυσικής - Δειγματοληψία

- Στόχος ο προσδιορισμός του $\langle Q \rangle$

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} P_{\mu} Q_{\mu} = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}$$

- Ορίζουμε τον εκτιμητή Q_M της ποσότητας Q που ακολουθεί την κατανομή P_M

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} P_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M P_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}} \quad \text{και περιμένουμε ότι} \quad \langle Q \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} Q_M$$

Simple Sampling

- Διαλέγουμε $P_M=1$ οπότε
- Εμείς στη πράξη

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M e^{-\beta E_{\mu_i}}}$$

title Simple Sampling

function ssamp(N)

$\omega_0 \leftarrow 0$

start: for $i=1$ **to** N **do**

$\omega_i \leftarrow$ ένας τυχαίος πλησιέστερος γείτονας της ω_{i-1}

if $\omega_i \in \{\omega_0, \dots, \omega_{i-1}\}$ **goto** *start*

end

return ω

Πόσο καλό είναι το Simple Sampling?

Simple Random walks Non - Reversible walks

$$\frac{c_N}{(2d)^N} \sim \left(\frac{\mu}{2d}\right)^N N^{\gamma-1}$$

$$\sim e^{-\lambda N} N^{\gamma-1}$$

$$\lambda = \ln \frac{2d}{\mu}$$

$$N < 10/\lambda \approx 60$$

$$\frac{c_N}{2d(2d-1)^{N-1}} \sim \frac{2d-1}{2d} \left(\frac{\mu}{2d-1}\right)^N N^{\gamma-1}$$

$$\sim e^{-\lambda' N} N^{\gamma-1}$$

$$\lambda' = \ln \frac{2d-1}{\mu}$$

$$N < 10/\lambda \approx 300$$

Importance Sampling

- Διαλέγουμε: $P_{\mu} = p_{\mu} = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{Z}$

- Οπότε ο εκτιμητής δίνεται από:

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} (e^{-\beta E_{\mu_i}})^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M (e^{-\beta E_{\mu_i}})^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}$$

- Εμείς χρησιμοποιούμε τον αλγόριθμο pino

Importance Sampling – pivot algorithm

ΒΗΜΑΤΑ του αλγορίθμου

1. Διάλεξε τυχαία έναν οποιοδήποτε περίπατο ω_0 από το W
2. Διάλεξε τυχαία ένα i από το $\{0, 1, \dots, N-1\}$.
 - Όρισε $\omega_t(i)$ τη θέση του περιπάτου που θα γίνει pivot
 - Διάλεξε τυχαία μία g
 - Θέσε $\omega'(k) = \omega_t(k) \quad k \leq i$
 - $\omega'(k) = g(\omega_t(k)) \quad k \geq i+1$
3. Αν ω' είναι self avoiding $\omega_{t+1} = \omega'(k)$ αλλιώς $\omega_{t+1} = \omega_t$
4. Αύξησε το t κατά 1 και πήγαινε στο βήμα 2.

ΜΟΝΤΕ ΚΑΡΛΟ

ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ ΜΑΡΚΟΝ

- $\mu \rightarrow \nu$ στοχαστικά
- Τελικά $\mu_0 \rightarrow \mu_1 \rightarrow \mu_2 \rightarrow \dots \rightarrow \mu_N$ αλυσίδα Markov
- $P(\mu \rightarrow \nu)$: Πιθανότητα μετάβασης
 - i. Ανεξάρτητη του χρόνου
 - ii. Χωρίς μνήμη
 - iii. $\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1$ προσοχή γενικώς $P(\mu \rightarrow \mu > 0)$
 - iv. Για $t \rightarrow \infty$, το δείγμα ακολουθεί την κατανομή Boltzmann

ΠΡΟΣΟΧΗ ΣΤΗΝ ΕΠΙΛΟΓΗ ΑΡΧΙΚΗΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ μ_0

ΜΟΝΤΕ ΚΑΡΛΟ

ΕΡΓΟΔΙΚΟΤΗΤΑ

- Αποτελεί συνθήκη για να λειτουργήσει η αλυσίδα Markov
- Στην πράξη θέτουμε τις περισσότερες $P(\mu \rightarrow \nu)$ μηδενικές
- Παρόλα αυτά δεν πρέπει να παραβιάζεται η εργοδικότητα

ΜΟΝΤΕ ΚΑΡΛΟ

ΛΕΠΤΟΜΕΡΗΣ ΙΣΟΖΥΓΙΣΗ

- Εξασφαλίζει ότι μετά την ισορροπία το σύστημα θα ακολουθεί την κατανομή Boltzmann
- Για να έχουμε ισορροπία πρέπει

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\mu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu)$$

- Ακόμη ισχύει ότι: $p_{\mu} = \sum_{\mu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu)$
- Η ικανή αλλά όχι αναγκαία συνθήκη είναι:

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu)$$

ΜΟΝΤΕ ΚΑΡΛΟ

ΛΕΠΤΟΜΕΡΗΣ ΙΣΟΖΥΓΙΣΗ

- Στην ισορροπία θα έχουμε

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

- Μόντε Κάρλο
 - Κωδικοποίηση των $P(\mu \rightarrow \nu)$
 - Επιλογή κατάλληλης μ_0
 - Thermalization
 - Υπολογίζουμε τον Q_M
 - Σταματάμε μόλις πετύχουμε την επιθυμητή ακρίβεια

ΜΟΝΤΕ ΚΑΡΛΟ

ΛΕΠΟΜΕΡΗΣ ΙΣΟΖΥΓΙΣΗ

- Γενικά: $P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)$
- Ακόμη $P(\mu \rightarrow \mu) = 1 - \sum_{\eta} P(\mu \rightarrow \nu)$ *Ελευθερία επιλογής P*
- Άρα $\sum_{\mu \neq \nu} P(\mu \rightarrow \nu) < 1$
- Στόχος όλα τα $A(\mu \rightarrow \nu) = 1$ για όλα τα ν για τα οποία $g(\mu \rightarrow \nu) > 0$

ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

ΑΝΕΞΑΡΤΙΣΙΑ – ΑΥΤΟΣΥΣΧΕΤΙΣΗ

- Αλυσίδες Markov → Συσχετισμένες καταστάσεις
- Συνάρτηση αυτοσυσχετισμού

$$\rho_Q(t) = \frac{\langle (Q(t') - \langle Q \rangle)(Q(t'+t) - \langle Q \rangle) \rangle_{t'}}{\langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle}$$

- Περιμένουμε $\rho_Q(t) \sim e^{-t/\tau_Q}$

ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

ΑΝΕΞΑΡΤΗΣΙΑ – ΑΥΤΟΣΥΣΧΕΤΙΣΗ

- Μετά από χρόνο $2\tau_Q$ η συνάρτηση πέφτει στο $1/e^2 \approx 14\%$ και συμβατικά θεωρούμε αποσυσχετισμό
- Άρα οι ανεξάρτητες μετρήσεις θα είναι:

$$n_Q = \frac{t_{max}}{2\tau_Q}$$

- Ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού

$$\tau_{int,Q} = \int_0^{+\infty} dt \rho_Q(t) \sim \int_0^{+\infty} dt e^{-t/\tau_Q} = \tau_Q$$

ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

Η εκτίμηση του τ δεν είναι εύκολη υπόθεση...

Παρόλα αυτά η ακριβής εκτίμηση του χρόνου αυτοσυσχετισμού δεν είναι ο μοναδικός στόχος



**ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΤΟΥ ΧΡΟΝΟΥ ΑΥΤΟΣΥΧΕΤΙΣΜΟΥ
ΑΠΟ ΤΙΣ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΥΣ ΤΟΥ
ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ**

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΡΙΝΟΤ

- Προσδιορίζει μία Μαρκοβιανή αλυσίδα στο σύνολο των περιπάτων σταθερού μήκους
- Αποδεικνύεται ότι είναι εργοδικός και ικανοποιεί τη συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης

ΟΡΙΣΜΟΙ - ΣΥΜΒΑΣΕΙΣ

- Πλεγματικά σημεία $\rightarrow \omega(i)$ με $0 \leq i \leq N$
- Nearest neighbor steps $\rightarrow \|\omega(i) - \omega(i-1)\| = 1, 0 \leq i \leq N$
- Self avoiding $\rightarrow \omega(i) \neq \omega(j), i \neq j$
- Δύο κυρίως παράγοντες ταχύτητας
 - Έλεγχος για self-intersections
 - Εφαρμογή των pivots

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΡΙΝΟΤ

- Βελτιωμένη υλοποίησή του σε αυτούς του τομείς από τον καθηγητή Tom Kennedy (<http://math.arizona.edu/~tgk/>)
- Παλαιότερες υλοποιήσεις χρειάζονταν $O(N)$ (καταγραφή διαδρομής)
- Υλοποίηση Tom Kennedy $O(N^q)$ $q < 1$
- Εκτιμάται πως $q < 0.57$ σε 2D και $q < 0.85$ σε 3D
- Στην πράξη σε **2D 80** φορές γρηγορότερος και σε **3D, 7**

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΡΙΝΟΤ

SELF INTERSECTIONS

- Nearest neighbor steps
- Έλεγχος $\omega(i) = \omega(j)$ για όλα τα i και j ? αφελές.....
- Υπολογίζουμε $d = \|\omega(i) - \omega(j)\|$
 - Αν $d = 0$ self intersection
 - Αν $d > 0$ τότε όχι μόνο $\omega(i) \neq \omega(j)$ αλλά
$$\omega(i') \neq \omega(j'), \text{ αν } |i - i'| + |j - j'| < d$$
- Μπορούμε να ελέγχουμε για διασταυρώσεις ΜΑΖΙΚΑ
- Πώς θα το εκμεταλλευτούμε αυτό?

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΡΙΝΟΤ

SELF INTERSECTIONS

- Έστω l η θέση του ρινοτ μέσα στον περίπατο
- Επιλέγω i , $l+1 \leq i \leq N$ και ελέγχω αν $\omega(i) = \omega(j)$, j $0 \leq j \leq l-1$.
- Αν $d = 0$ self intersection
- Αν $d > 0$ τότε σίγουρα $\omega(i) \neq \omega(j)$ αλλά επίσης σίγουρα $\omega(j-1), \dots, \omega(j-d+1) \neq \omega(i)$
- Αντί να μειώσω το j κατά 1 το μειώνω κατά d
- Για i από $l+1$ έως N πάλι χρειαζόμαστε $O(N)$ πράξεις...
- Πώς θα επιλέγουμε τα i και j για να γίνουμε ταχύτεροι?

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΠΙΒΟΤ

SELF INTERSECTIONS

- Αρχικά $i = l + 1$ και $j = l - 1$, l pivot location
- Σε κάθε βήμα αυξάνουμε το i ή μειώνουμε το j έτσι ώστε
$$\omega(i') \neq \omega(j') \quad j < j' < l < i' < i$$
- Έστω $m_i = \min\{\omega(i) - \omega(k) : j < k < l\}$
 - Αν $m_i = 0$ self intersection
 - Αν $m_i > 0$ $\omega(i') \neq \omega(j')$ για κάθε i', j' με $i \leq i' + m_i$ και $j < j' < l$
- Άρα αυξάνω το i κατά m_i . Ανάλογα πράτω και για το j .
- Στην πράξη υπολογίζω ένα κατώτατο όριο b_i του m_i .
- Αυτό γίνεται με ένα loop για j' από $l - 1$ έως j .
- Αρχικά $b_i = N$, $j' = l - 1$ και $d = \|\omega(i) - \omega(j')\|$
 - Αν $d < b_i$ παίρνουμε $s = d/2$ και τελικά $j' = j' - 1 - s$ ($b_i = \min\{b_i, d - s\}$)
 - Αν $d \geq b_i$ παίρνουμε $s = d - b_i$ και τελικά $j' = j' - 1 - d + b_i$ (b_i ίδιο)

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΡΙΝΟΤ

SELF INTERSECTIONS - Παράδειγμα

- Βήμα 1

Αρχικά $i=l+7, j=l-11, j'=l-1, b_i=N$

$d=6 \rightarrow s=d/2=3, b_i=\min\{N, d-s\}=3$

$j':=j'-1-s=l-5$

- Βήμα 2

$i=l+7, j'=l-5, b_i=3$

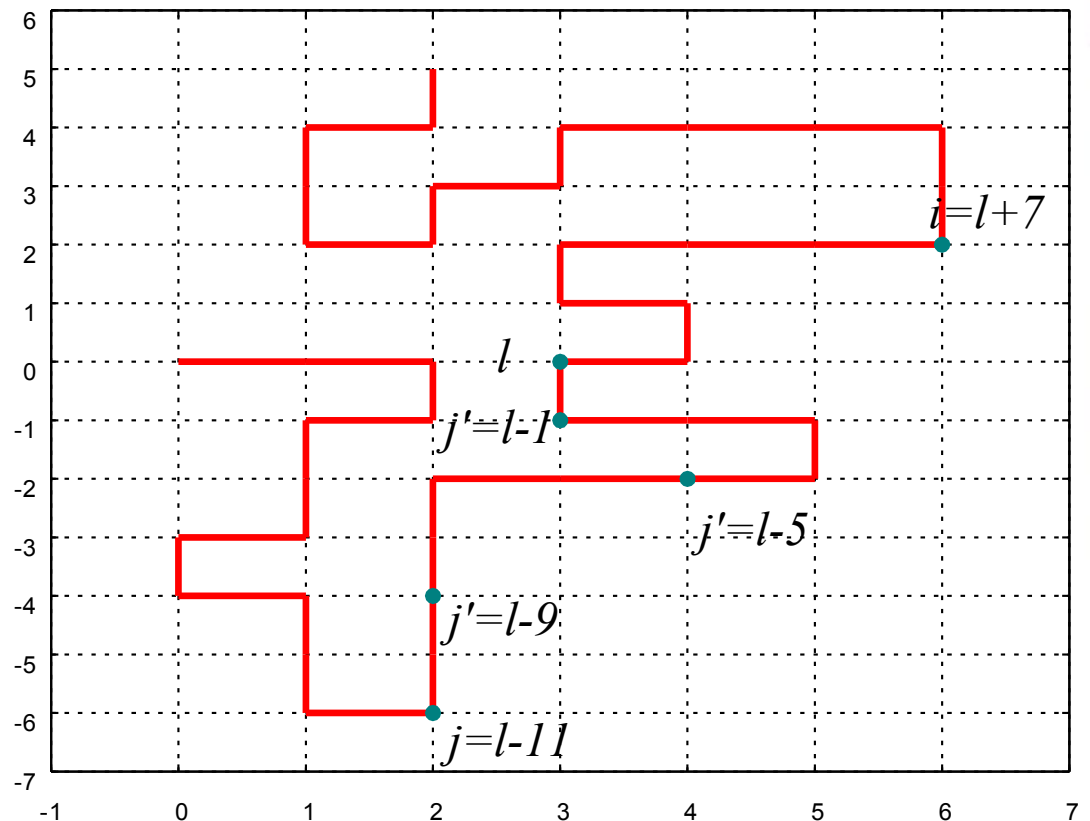
$d=6 \rightarrow s=d-b_i=3, j':=j'-1-s=l-9$

- Βήμα 3

$i=l+7, j'=l-9, b_i=3$

$d=10 \rightarrow s=d-b_i=7, j':=j'-1-s=l-17$

- **Τελικά $b_i=3$ άρα $i:=i+b_i$**



Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΠΙΝΟΤ

Carrying out the pivot

- Καταγραφή περιπάτου N βημάτων \rightarrow χρόνος $\sim O(N)$
 - **Η ιδέα:** Δεν καταγράφω τον περίπατο σε κάθε αποδεκτό pivot
 - **Αλλά,** σημειώνω τα αποδεκτά pivots και τα εφαρμόζω μαζικά

Το pivot δρα στον περίπατο ως εξής:

$$\bar{\omega}(j) = \begin{cases} \omega(j), & \text{για } j \leq l \\ g[\omega(j) - \omega(l)] + \omega(l), & \text{για } j \geq l \end{cases} \quad (1)$$

Λίστα δεδομένων

- ο παλιός περίπατος ω' .*
- Ένας ακέραιος n που είναι ο αριθμός των pivots που έχουν γίνει αποδεκτά αλλά δεν έχουν εφαρμοσθεί ακόμη*
- Οι θέσεις των pivots στον περίπατο, $l_1 < l_2 < \dots < l_n$*
- Οι συμμετρίες πλέγματος g_1, g_2, \dots, g_n*
- Τα σημεία στο πλέγμα x_1, x_2, \dots, x_n*

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΡΙΒΟΤ

Carrying out the pivot

- Άρα ο περίπατος θα υπολογίζεται από την $\omega(j) = g_i \omega'(j) + x_i$, για $l_i \leq j \leq l_{i+1}$ (2)
- Ο έλεγχος αποδοχής γίνεται από την (1) και (2)
- Όταν αποδεχτούμε ένα pivot l , g ($l_k < l < l_{k+1}$):

• Βήμα 1

(ii) $n \rightarrow n + 1$

(iii) $l_1, l_2, \dots, l_n \rightarrow l_1, l_2, \dots, l_k, l, l_{k+1}, \dots, l_n$

(iv) $g_1, g_2, \dots, g_n \rightarrow g_1, g_2, \dots, g_{k-1}, g_k, g_k, g_{k+1}, \dots, g_n$

(v) $x_1, x_2, \dots, x_n \rightarrow x_1, x_2, \dots, x_{k-1}, x_k, x_k, x_{k+1}, \dots, x_n$

• Βήμα 2

- $l = l_k$. Υποθέτω j τέτοιο ώστε: $l_i \leq j \leq l_{i+1}$, $i \geq k$. Επομένως

- $\bar{\omega}(j) = g[\omega(j) - x] + x = g[g_i \omega'(j) + x_i - x] + x = g g_i \omega'(j) + g x_i - g x + x$, $x = \omega(l_k)$.

- Τότε για $i \geq k$, $x_i \rightarrow g x_i - g x + x$ και $g_i \rightarrow g g_i$

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΡΙΝΟΤ

Τα 3 βήματα που θέλουν χρόνο...

- 1) Για κάθε προτεινόμενο ρινοτ πρέπει να αποφασίσουμε αν θα το δεχτούμε ή όχι
- 2) Για κάθε αποδεκτό ρινοτ πρέπει να ενημερώσουμε τα (ii) – (v) στη λίστα
- 3) Για κάθε N_{pivot} αποδεκτά ρινοτς πρέπει να τα εφαρμόσουμε και να ενημερώσουμε το (i)

$$O(N^\sigma \ln(N_{pivot})) + O(N_{pivot}) + O\left(\frac{N}{N_{pivot}}\right)$$

- Παίρνουμε N_{pivot} ανάλογο του $N^{1/2}$. $(N/40)^{1/2}$ είναι καλή επιλογή. Άρα

$$O(N^\sigma \ln(N)) + O(N^{1/2})$$

Simulations – Simple Sampling

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ

- Μοντέλο : NRRW
 - Προσθήκη array με σημαίες ελέγχου
- Δείγμα 10^8 περιπτώσεων
- Για καταγραφή των $N > 15$ με CPU Intel Core2 DUO 2.13GHz χρειάστηκαν 122m 50s
- Παρατηρήσιμα μεγέθη: R^2, E

ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

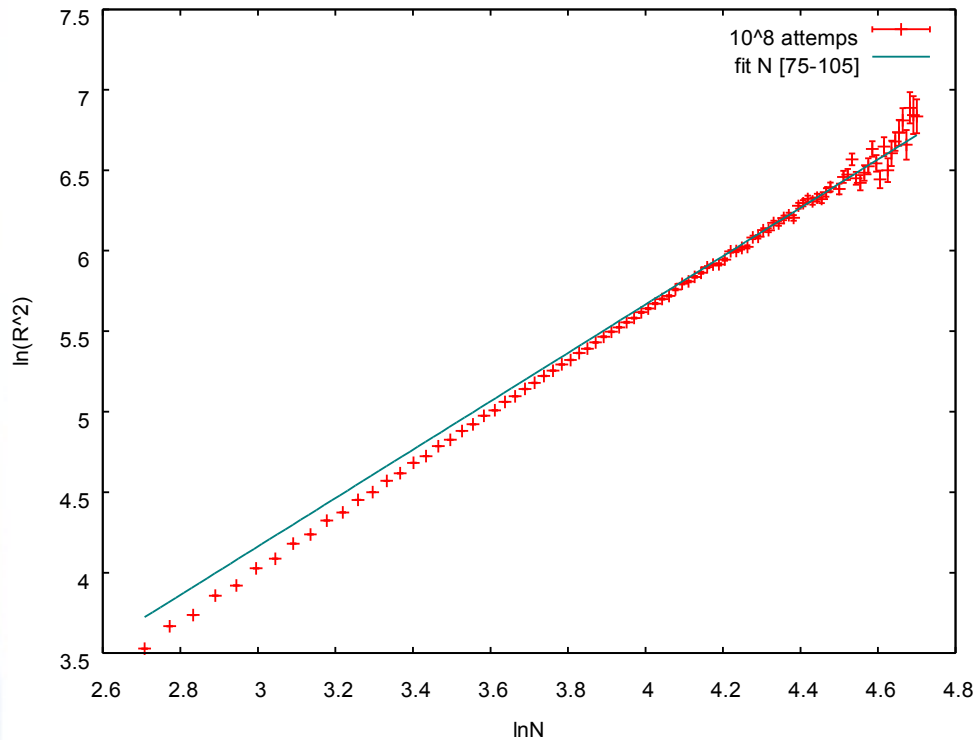
- Κρίσιμος εκθέτης ν
- Σταθερά φθοράς λ
- Συνδετική σταθερά πλέγματος μ
- Εκτίμηση του ν σε διάφορες θερμοκρασίες

Simulations – Simple Sampling 2ν

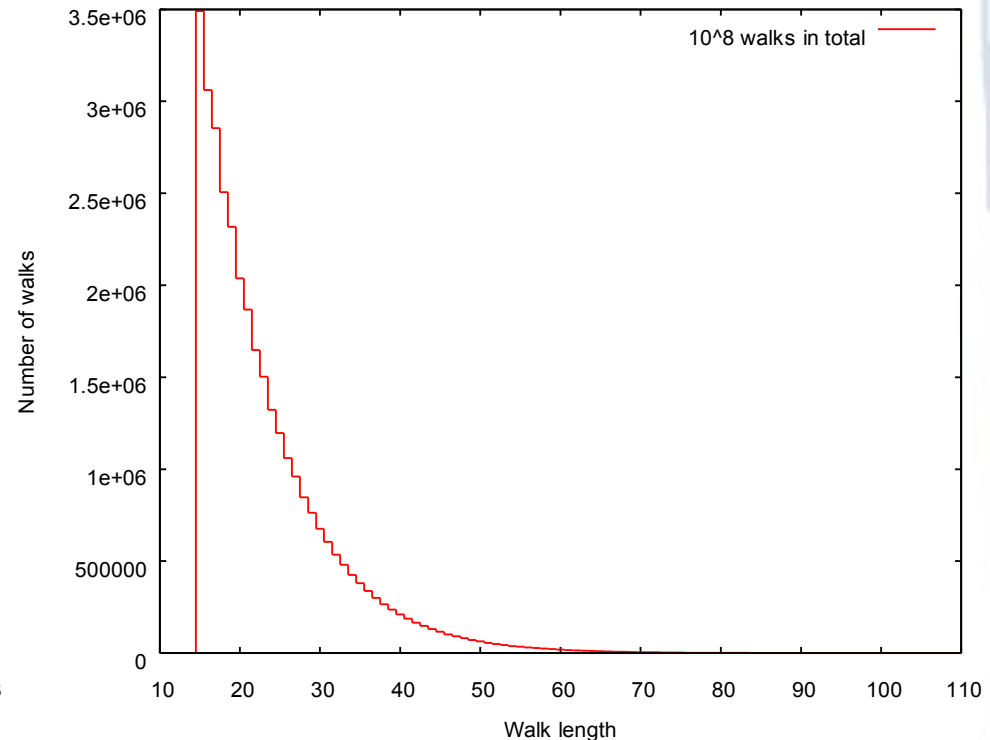
$$\langle R^2 \rangle = AN^{2\nu}[1 + O(N^{-4})] \quad N \rightarrow \infty, \quad \langle R^2 \rangle \sim AN^{2\nu}$$

$$\text{fit: } \ln R^2 = \ln A + 2\nu \ln N$$

$$\frac{c_N}{2d(2d-1)^{N-1}} \sim e^{-\lambda N} N^{\gamma-1}$$



$2\nu : 1.50(6)$



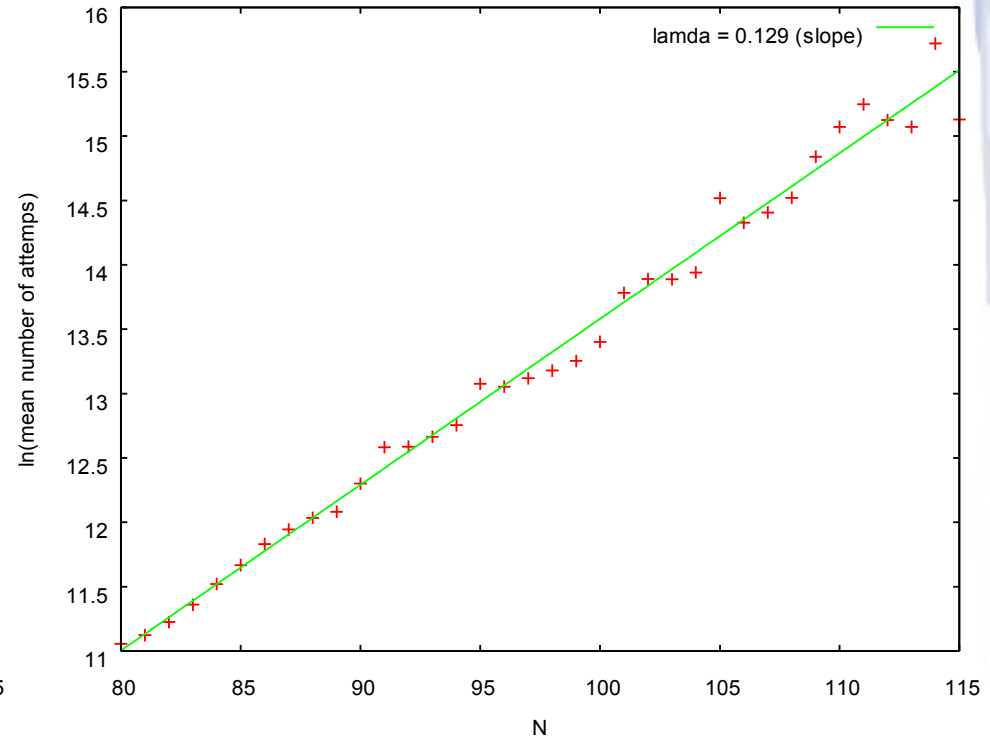
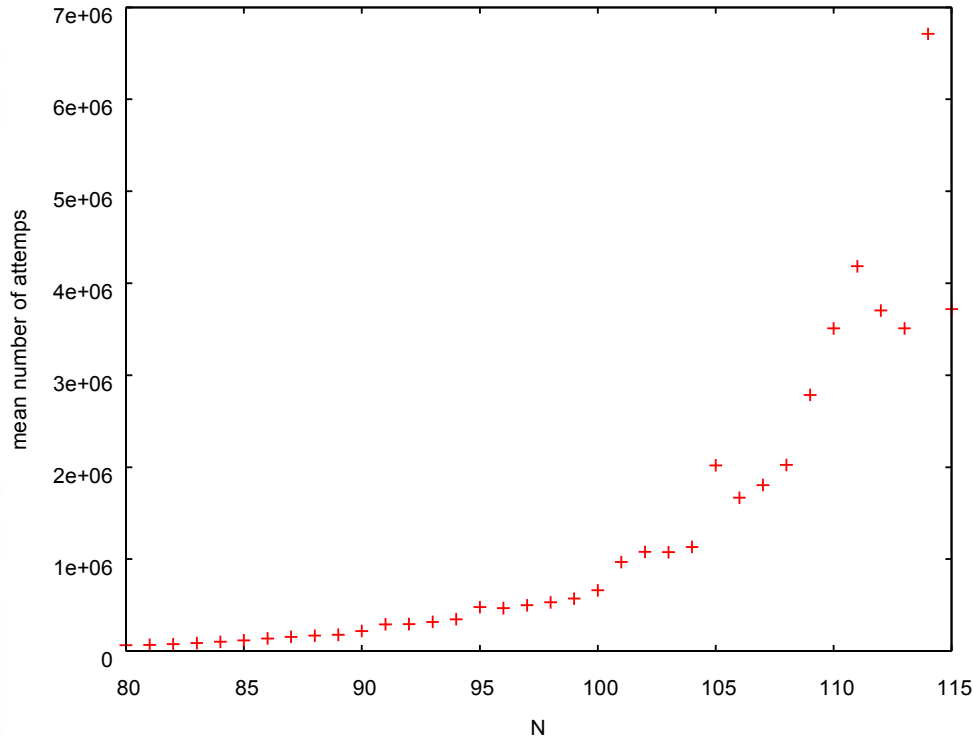
Attrition constant (λ)

Simulations – Simple Sampling λ, μ

Sample of 10^9 walks

$$\text{meanNo.} \sim e^{\lambda N}, \quad \lambda = \ln \frac{2d-1}{\mu}$$

slope = λ



$$\lambda = 0.129(2), \quad \mu = 2.637(5)$$

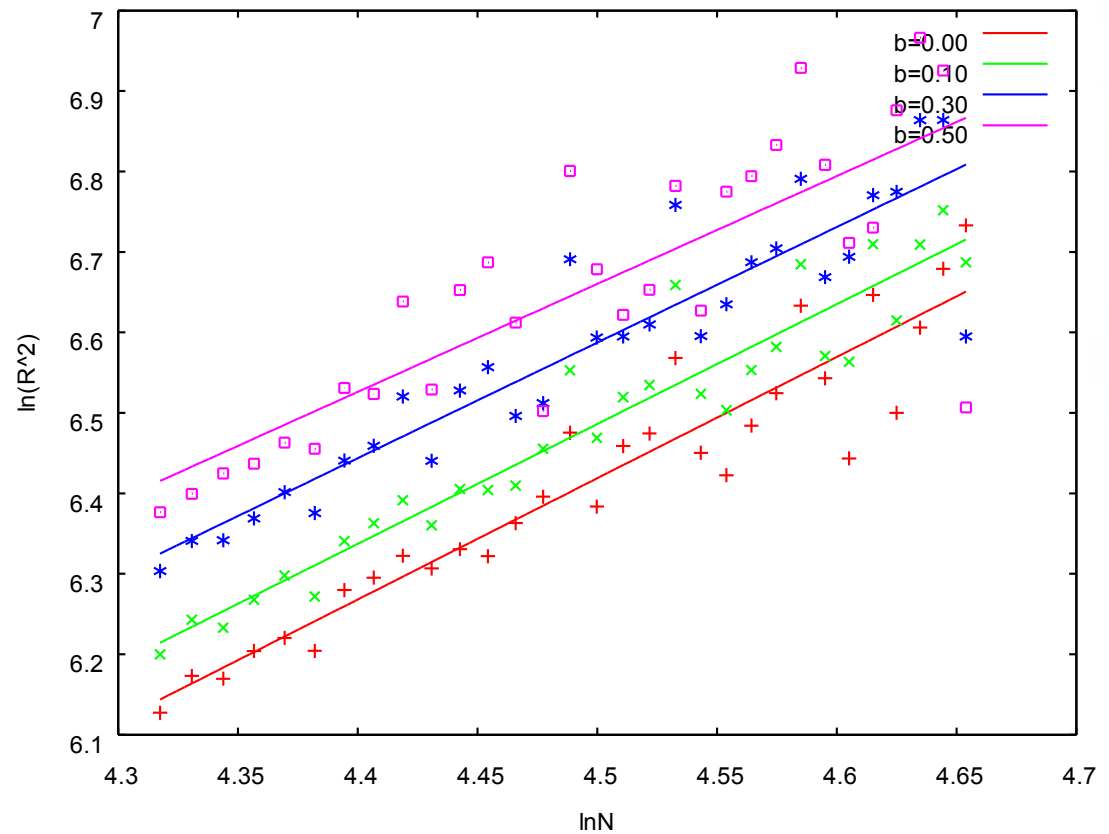
Simulations – Simple Sampling $\beta \neq 0$

$$\text{Εκτιμητής: } R_M^2 = \frac{\sum_{i=1}^M R_{\mu_i}^2 e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M e^{-\beta E_{\mu_i}}} \quad \text{fit: } \ln R^2 = \ln A + 2\nu \ln N$$

$$2\nu(\beta=0.10) = 1.49(8)$$

$$2\nu(\beta=0.30) = 1.44(11)$$

$$2\nu(\beta=0.50) = 1.34(18)$$



Simulations – Simple Sampling

ΑΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ

- $\beta=0$

$2v = 1.50 \pm 0.06$	αναμενόμενη τιμή	1.5
$\lambda = 0.129 \pm 0.002$	αναμενόμενη τιμή	0.129
$\mu = 2.637 \pm 0.005$	αναμενόμενη τιμή	2.638 158 5 (10)

- $\beta \neq 0$

Για $\beta=0.10$ $2v = 1.49 \pm 0.08$

Για $\beta=0.30$ $2v = 1.44 \pm 0.11$

Για $\beta=0.50$ $2v = 1.34 \pm 0.18$

Η απλή δειγματοληψία δεν είναι αποδοτική για $\beta > 0.5$ και περιγράφει μόνο τη φάση υψηλής θερμοκρασίας

- Αναμένουμε

- $2v = 1$ στη μετάβαση φάσης
- $2v = 2/3$ στη φάση χαμηλής θερμοκρασίας

Simulations - PIVOT

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ

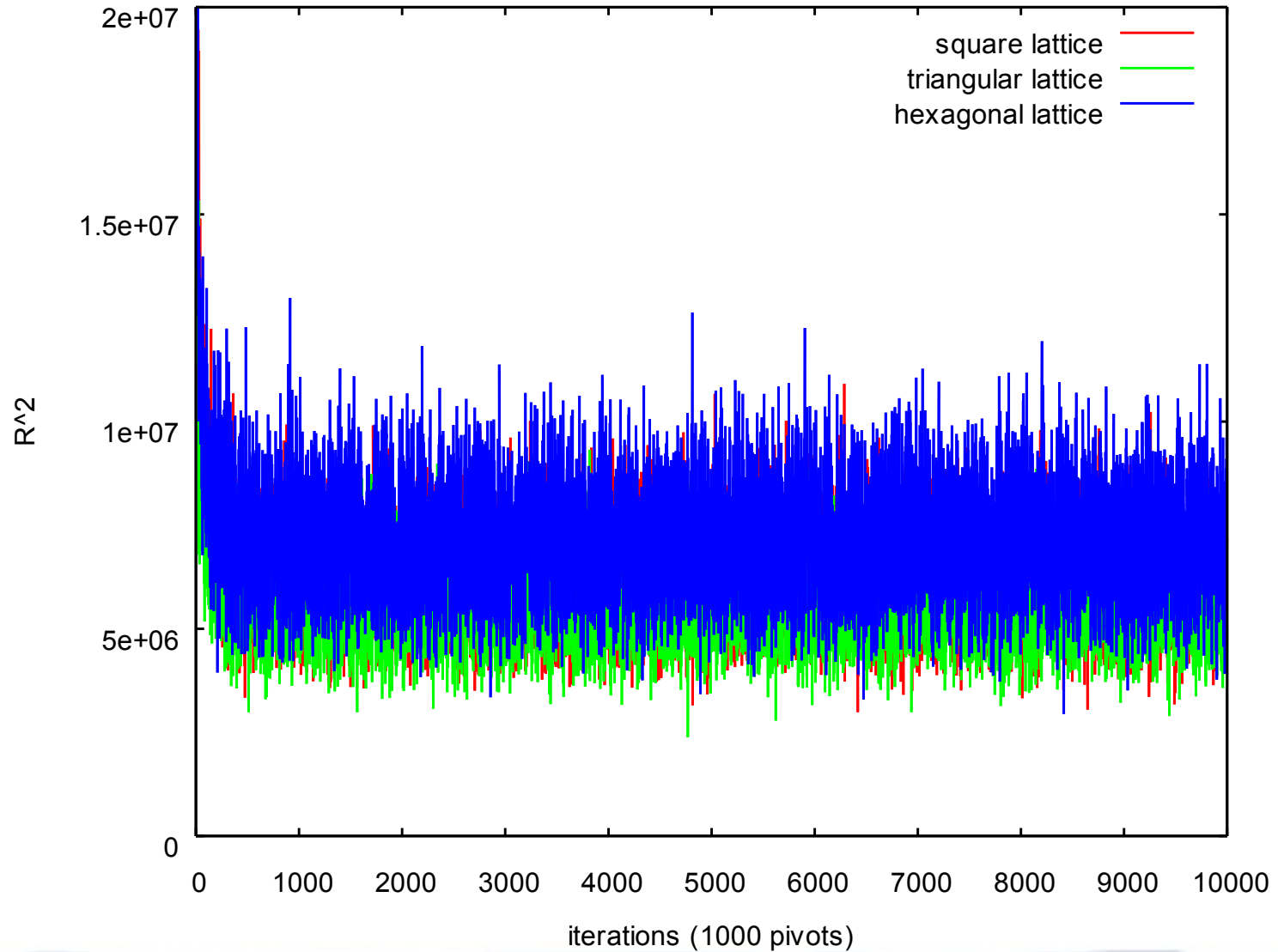
- Μοντέλο: Pivot algorithm
- Μήκη περιπάτων: $N = 1,000 - 100,000$
- Έγιναν 10,000 μετρήσεις για κάθε μήκος N .
 - Εφαρμόστηκαν 1000 pivots/μέτρηση
- Προσομοίωση σε τετραγωνικό, τριγωνικό και εξαγωνικό πλέγμα
- Παρατηρήσιμα μεγέθη R^2, turn, f

ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

- Κρίσιμος εκθέτης ν και συντελεστής πλάτους A για $\beta=0$
- Κρίσιμος εκθέτης ρ
- Χρόνοι αυτοσυσχετισμού

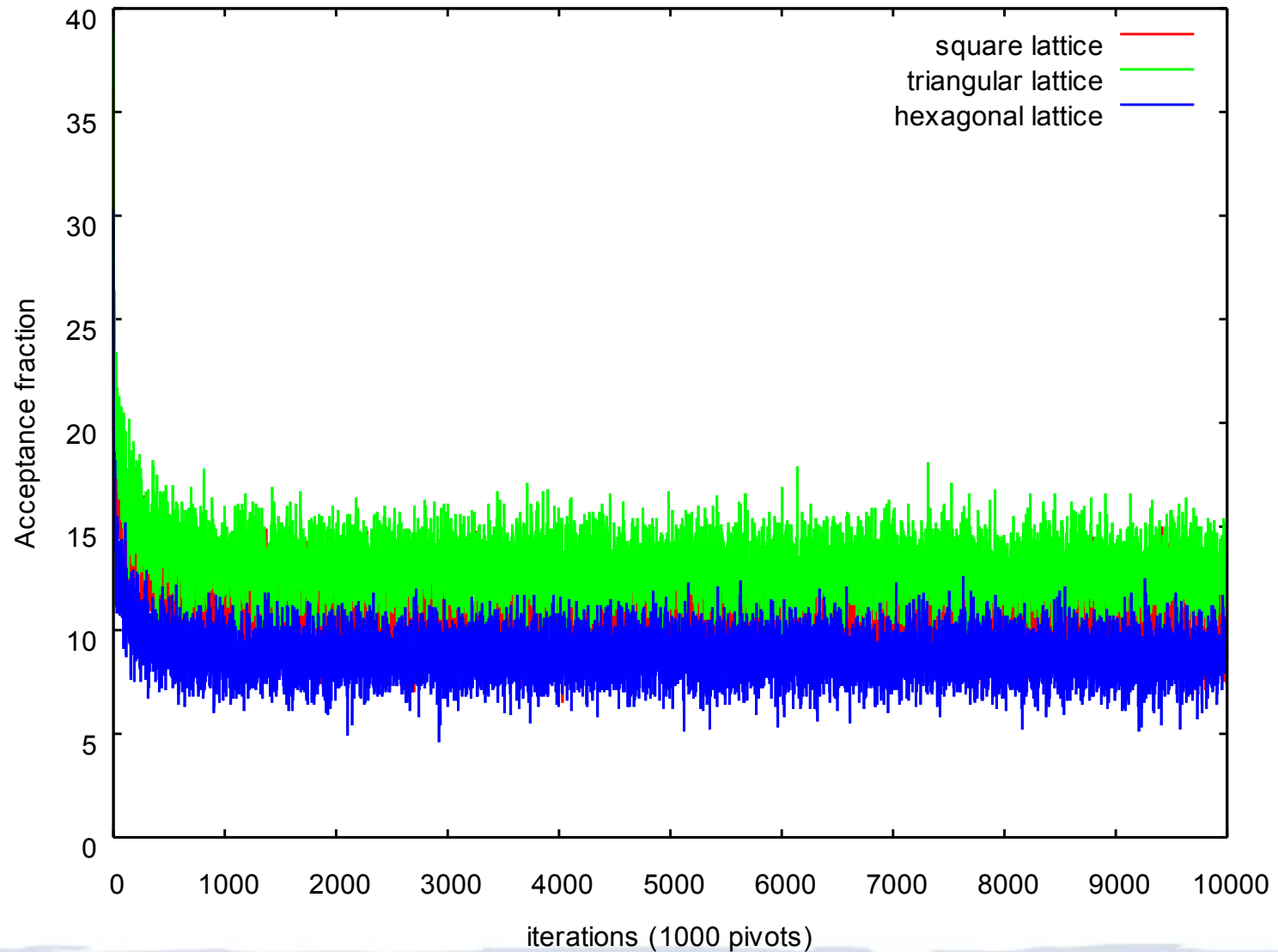
Simulations - PIVOT

Thermalization



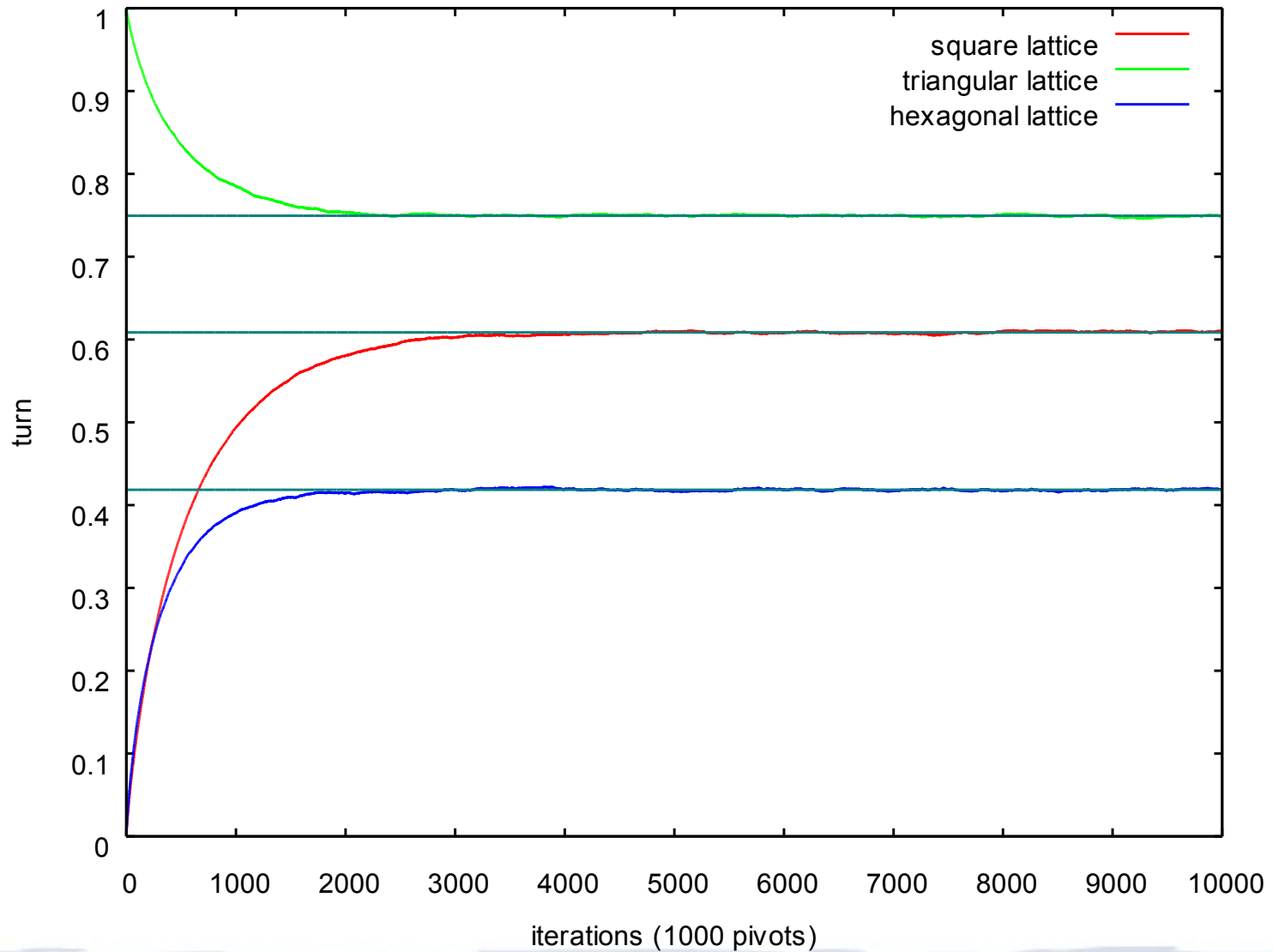
Simulations - PIVOT

Thermalization



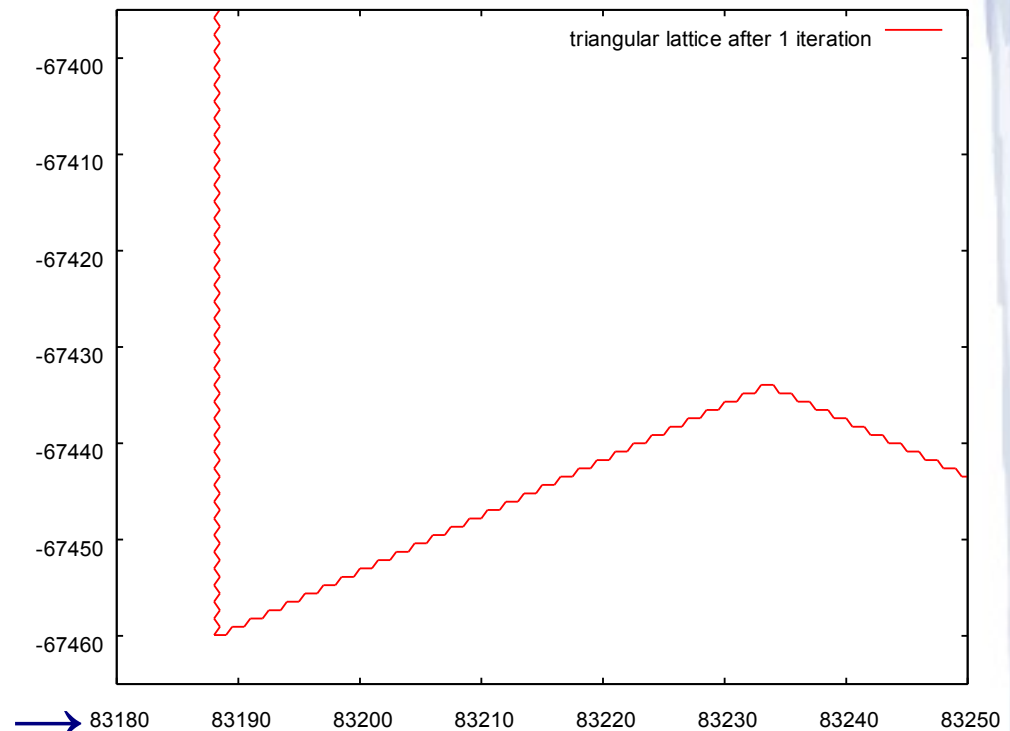
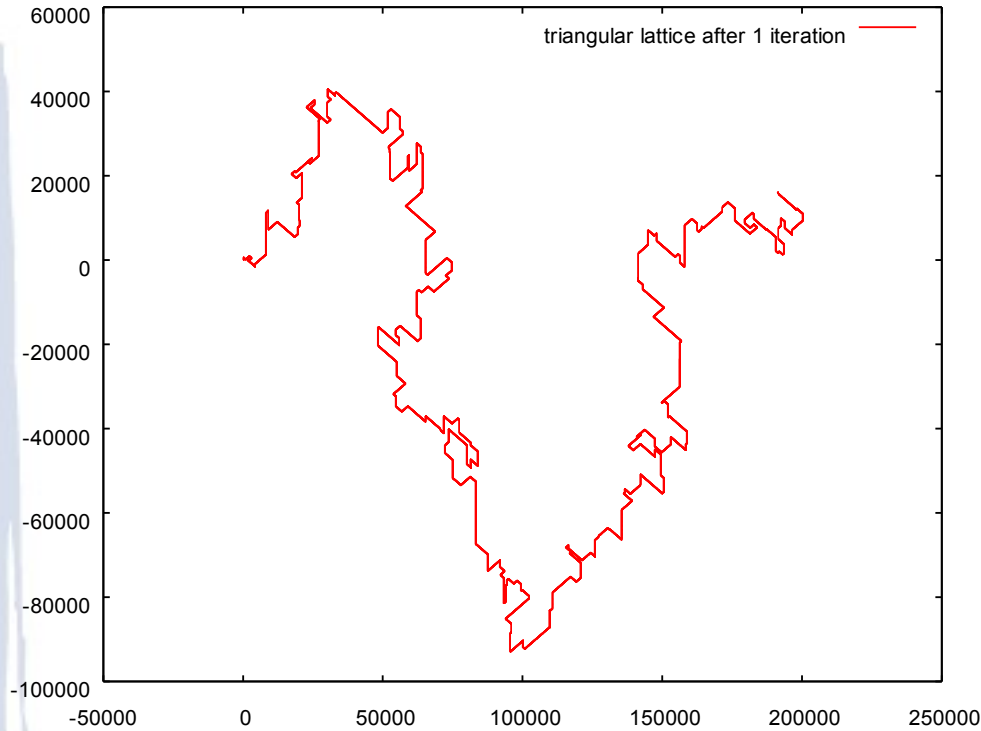
Simulations - PIVOT

Thermalization



Simulations – PIVOT

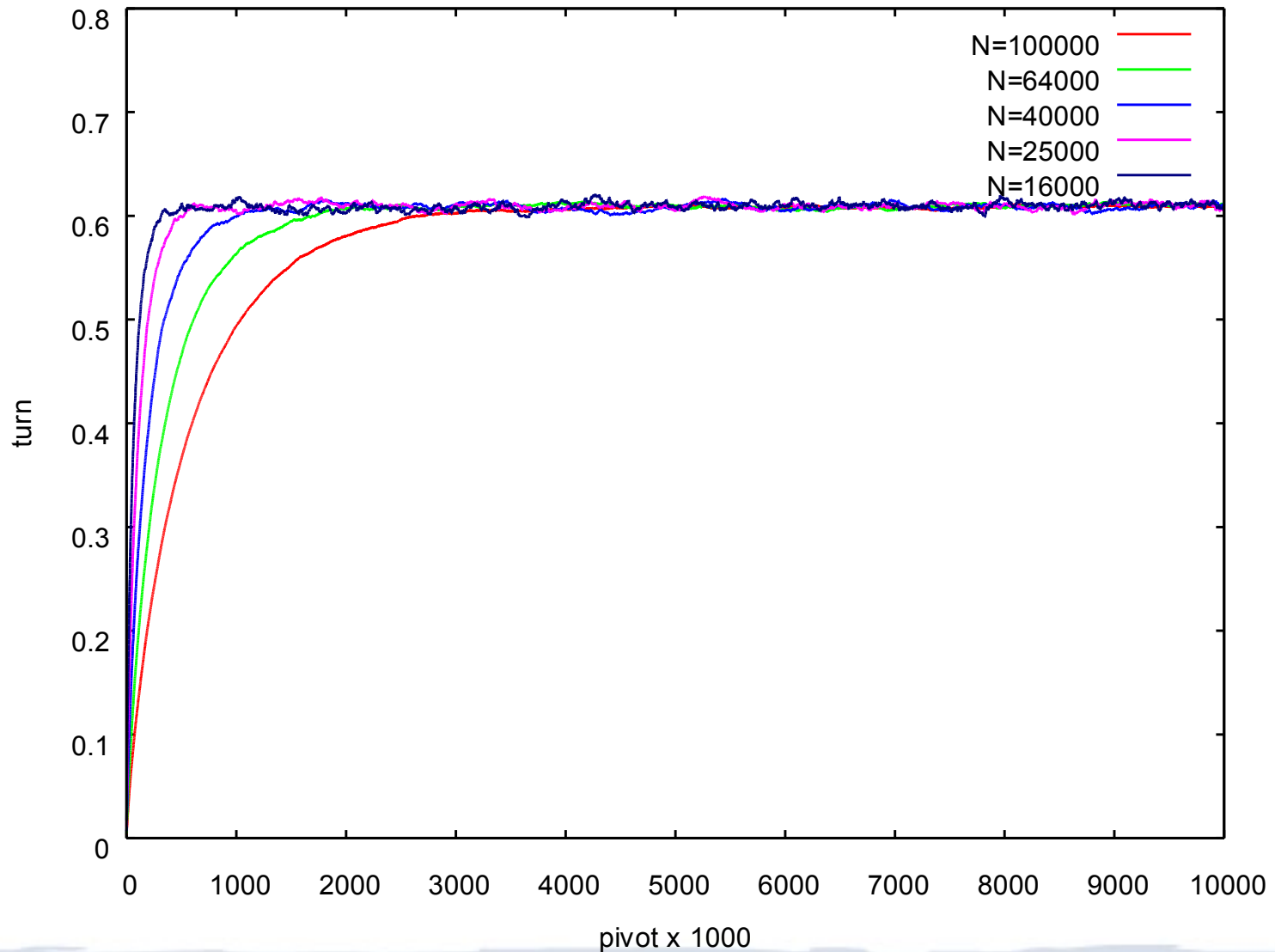
Turn triangular lattice



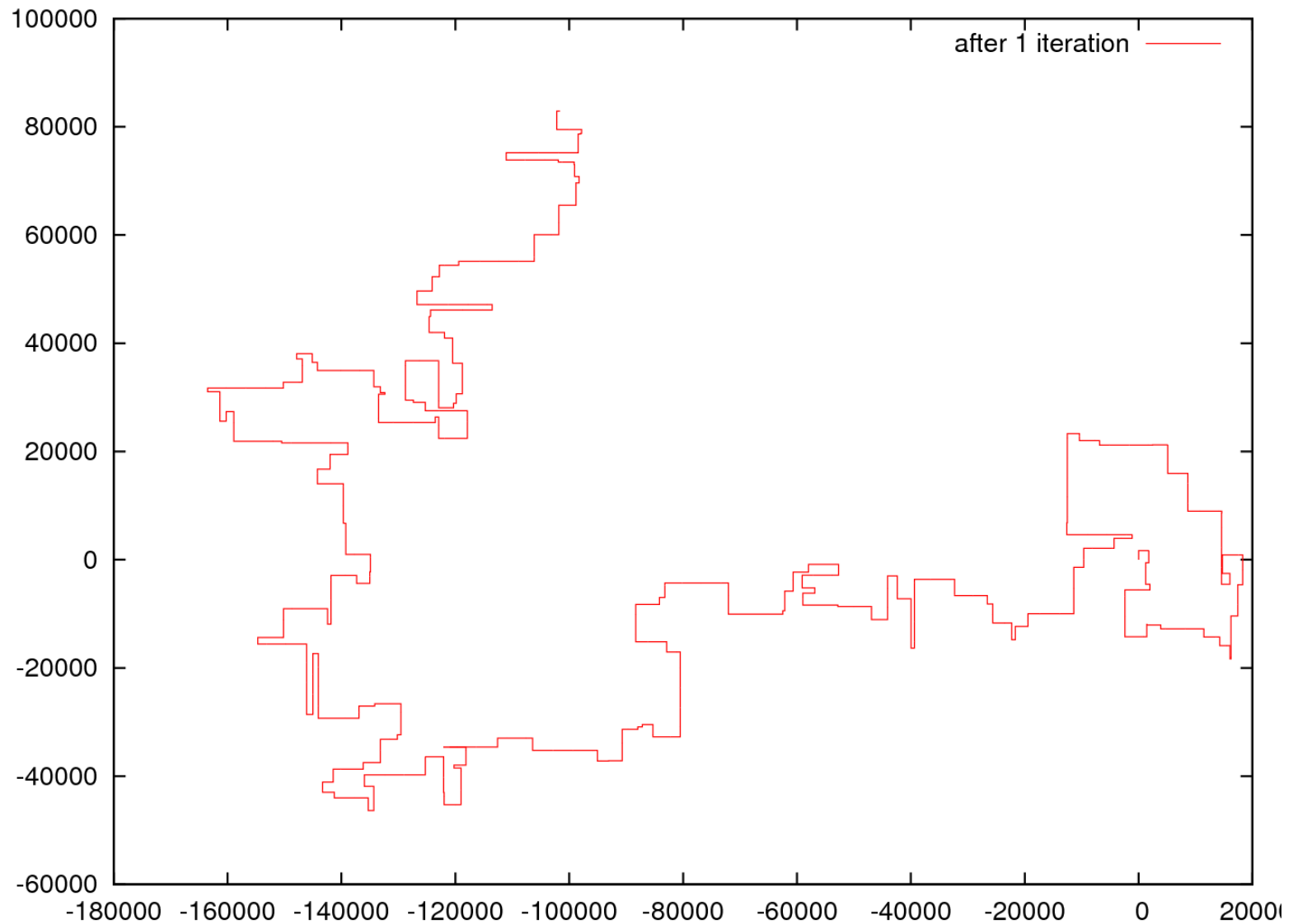
zoom

Simulations - PIVOT

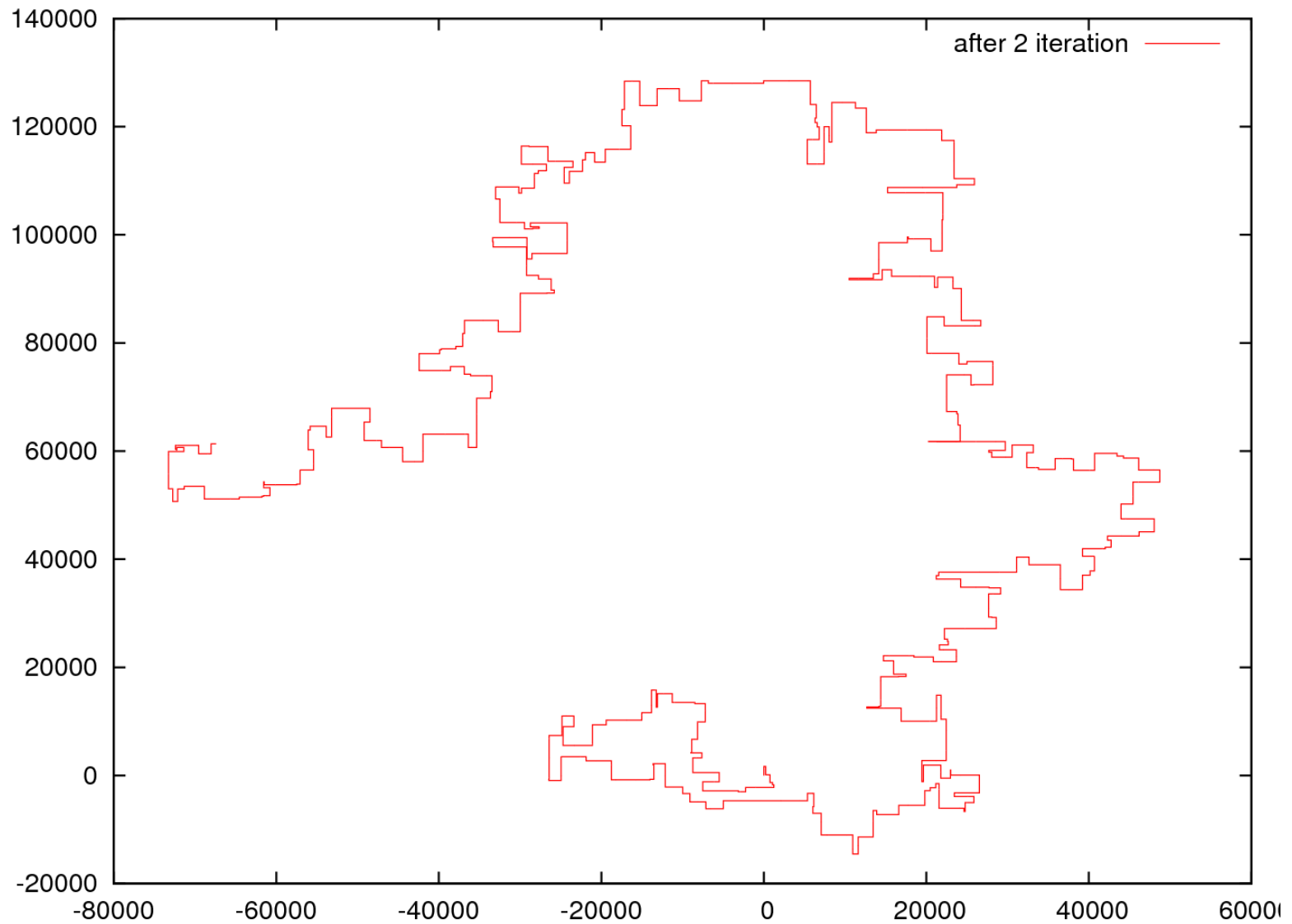
Thermalization – Square lattice



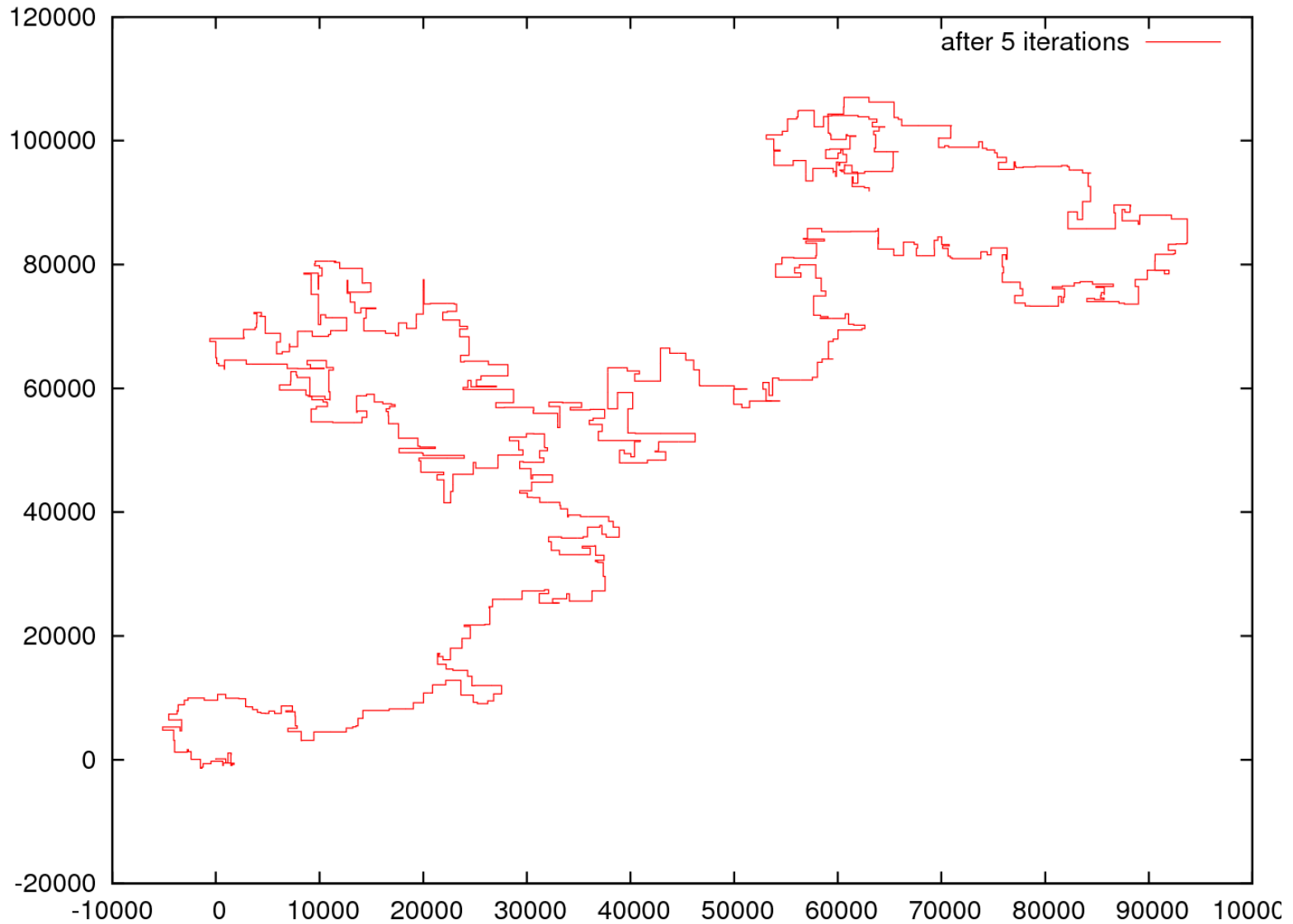
$N=10^6$ Thermalizing...



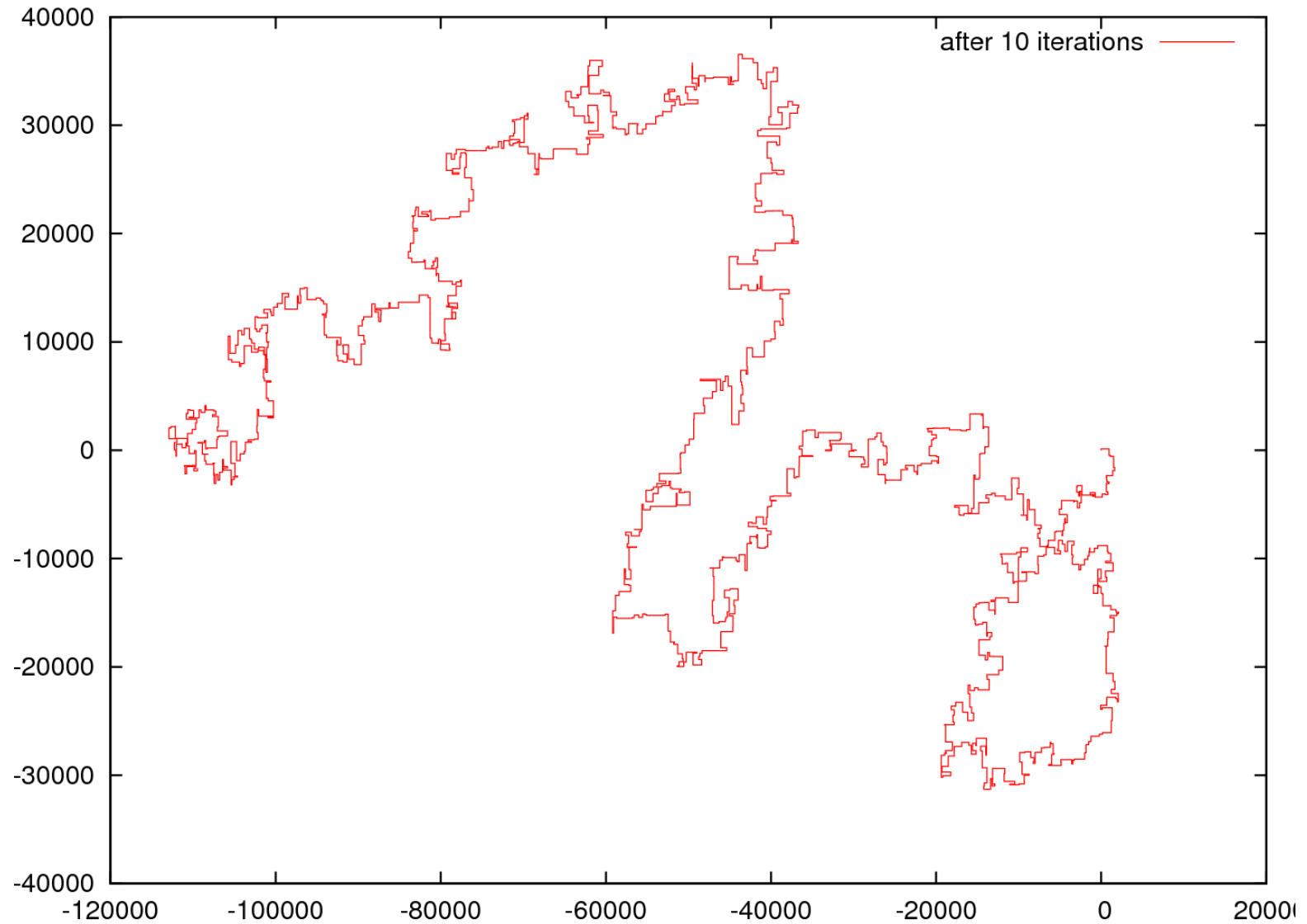
$N=10^6$ Thermalizing...



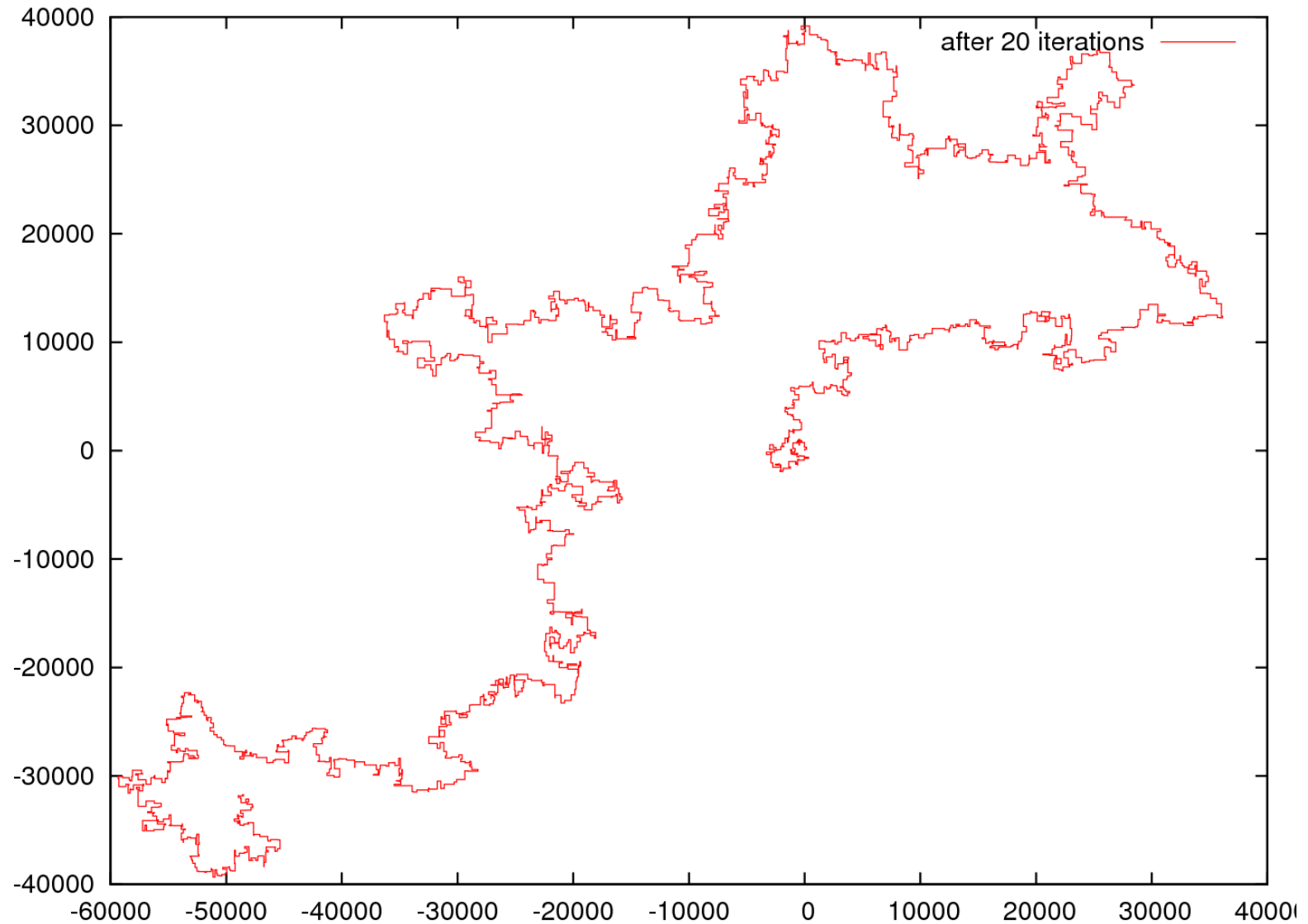
$N=10^6$ Thermalizing...



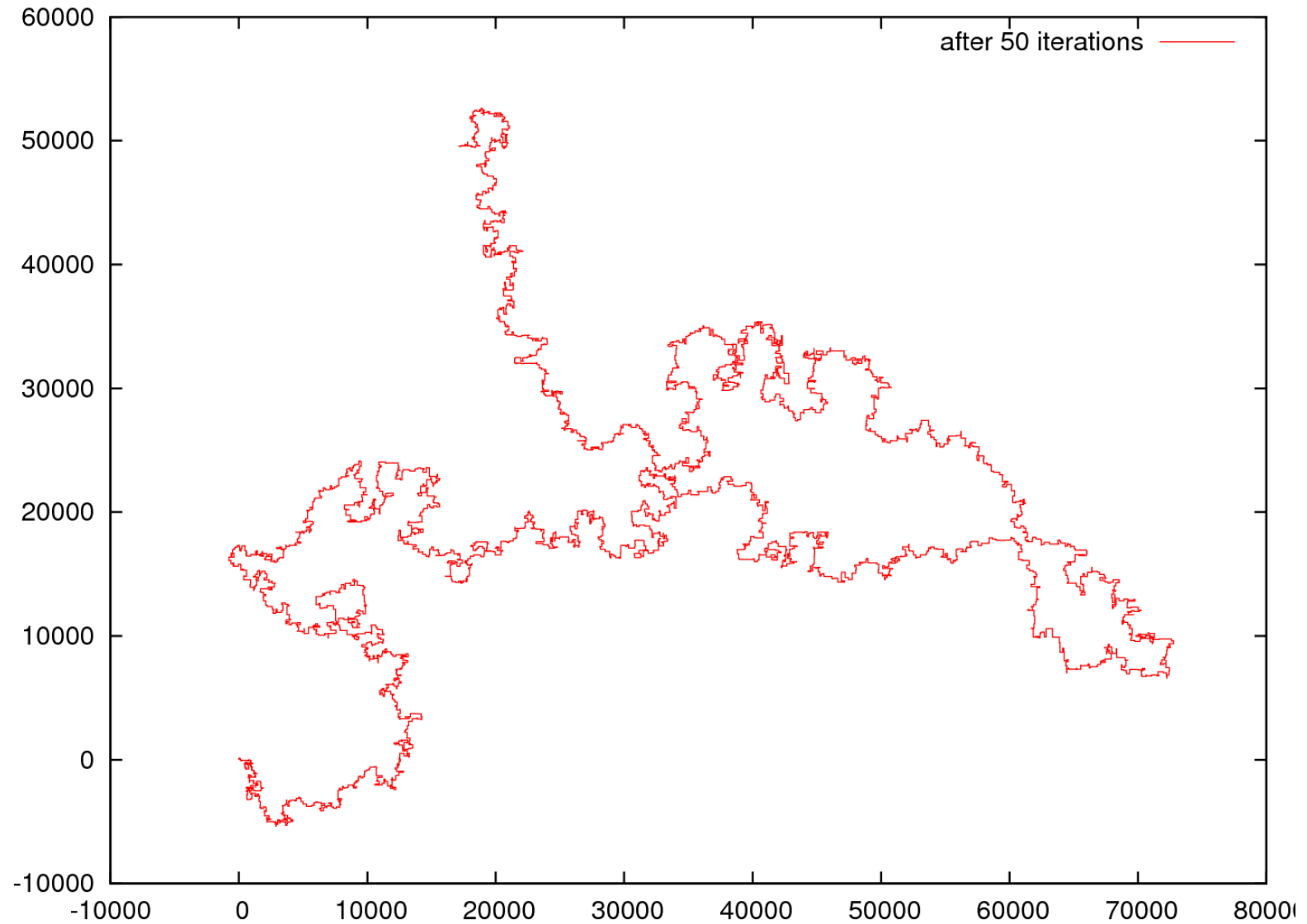
$N=10^6$ Thermalizing...



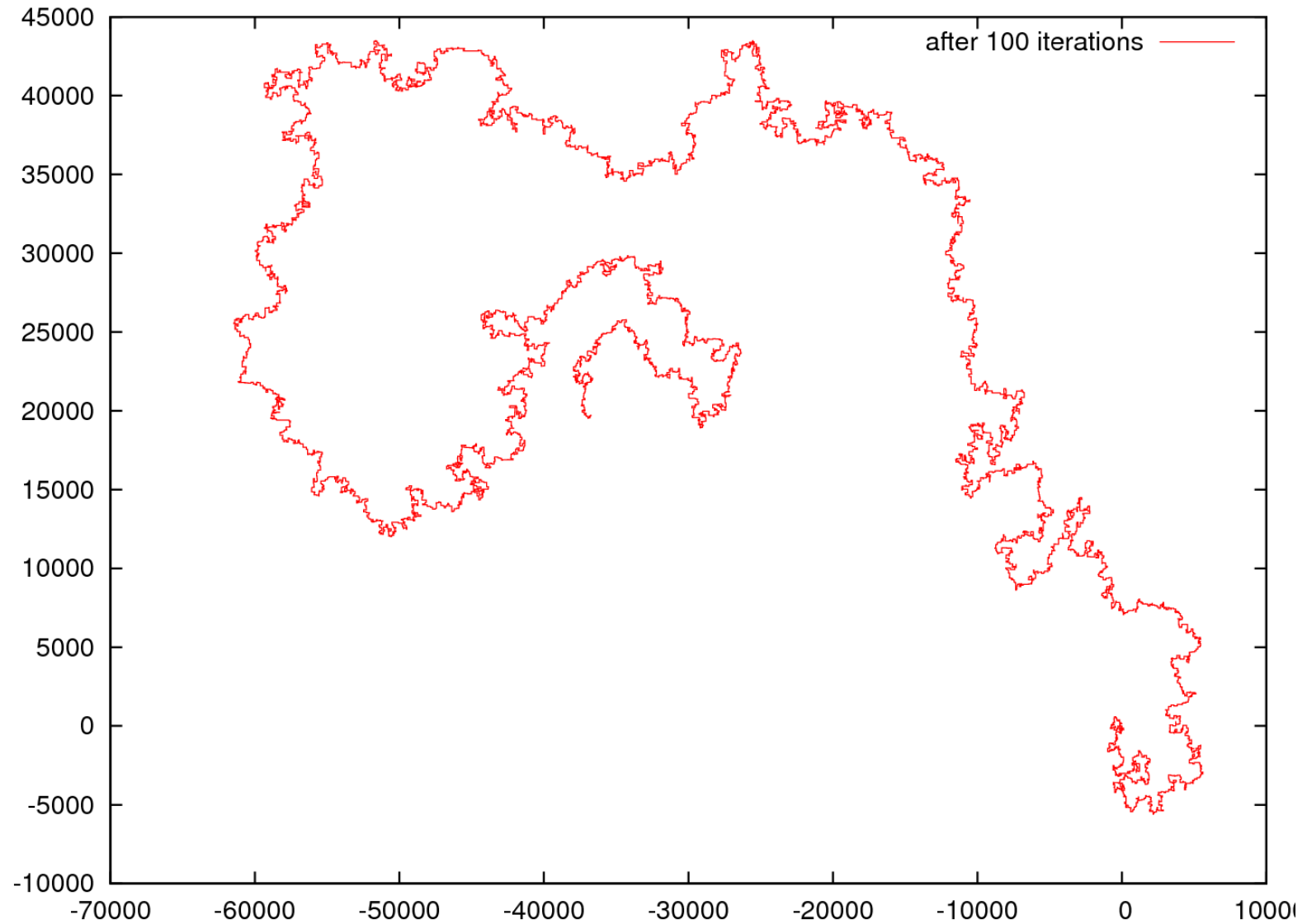
$N=10^6$ Thermalizing...



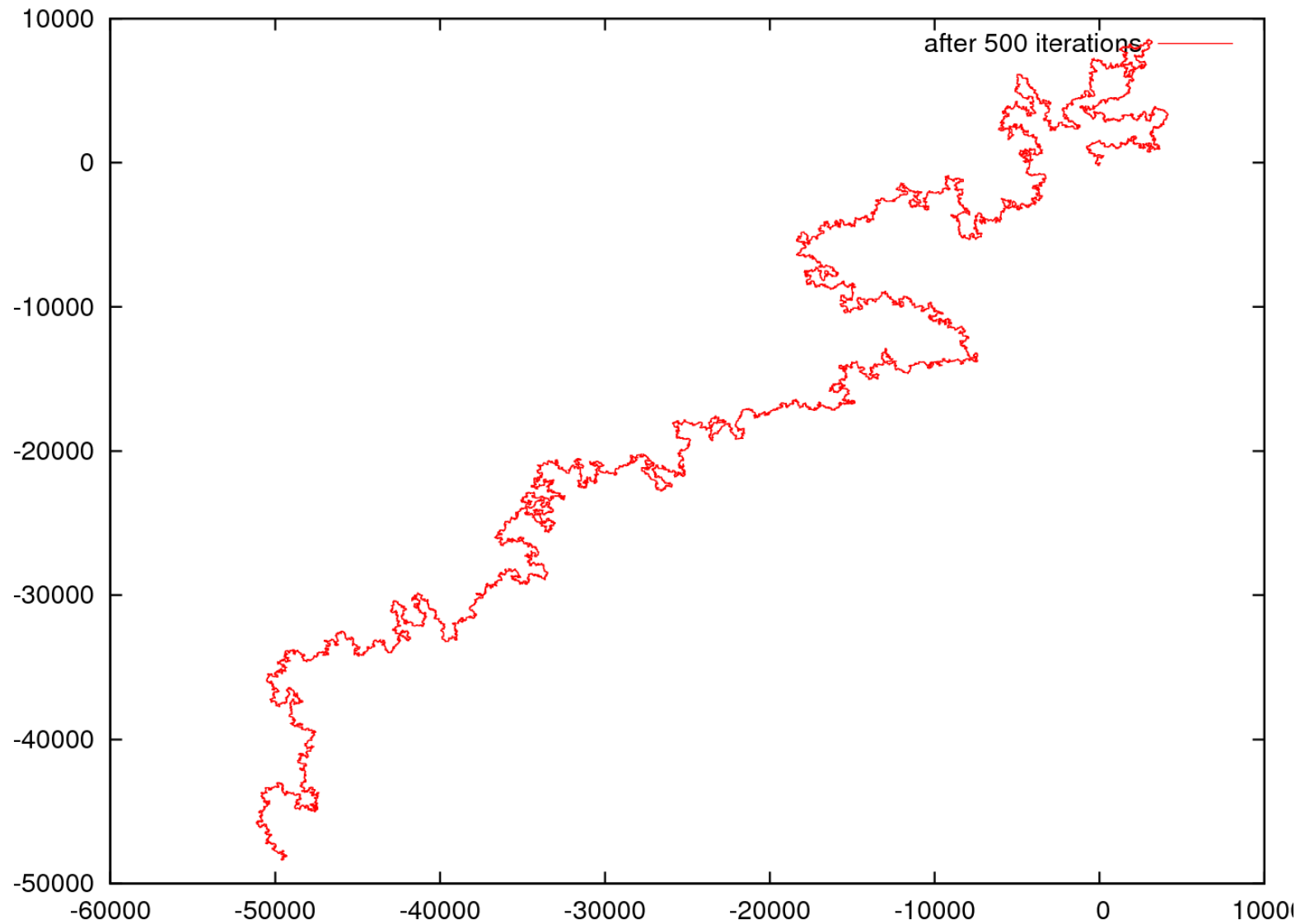
$N=10^6$ Thermalizing...



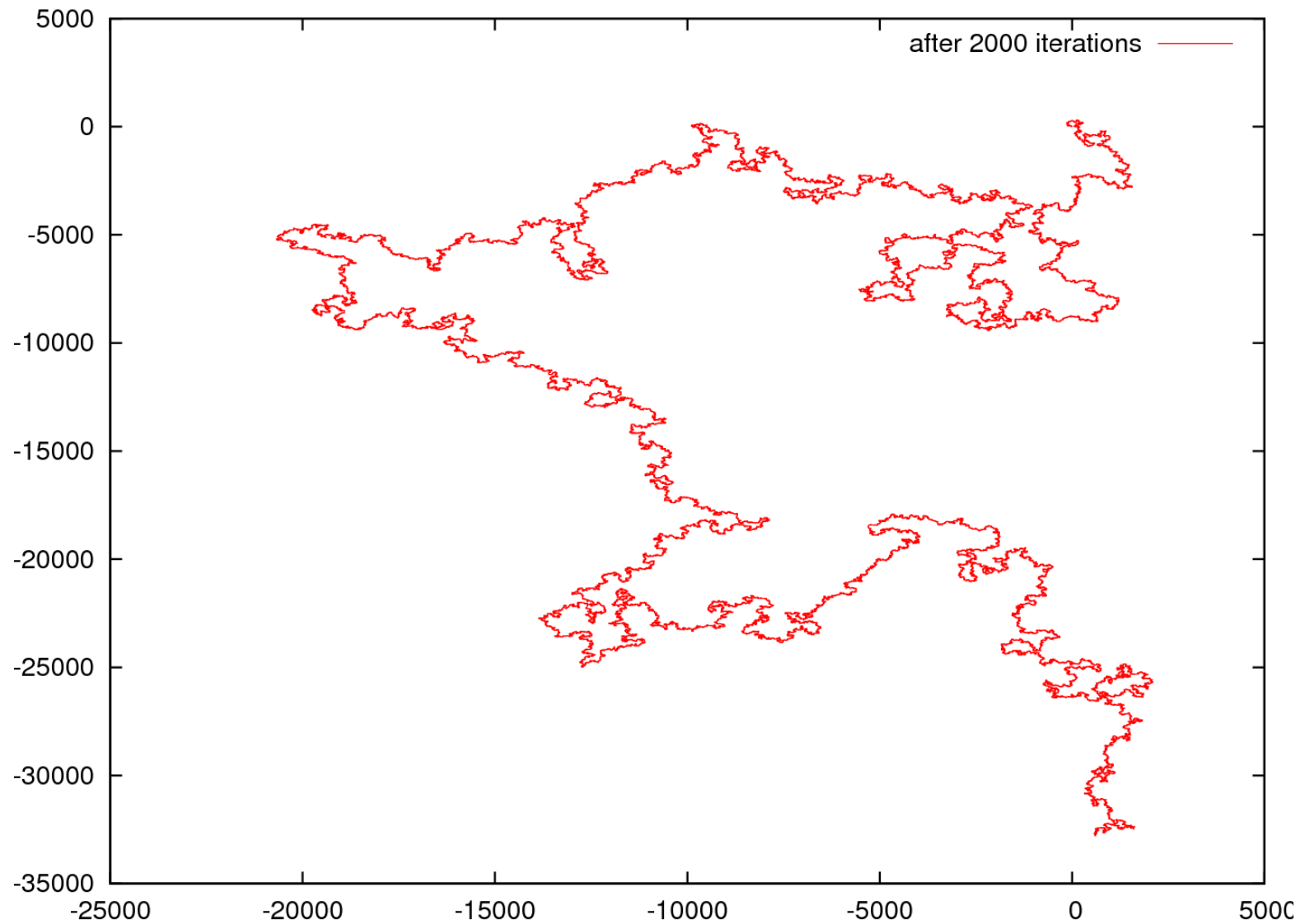
$N=10^6$ Thermalizing...



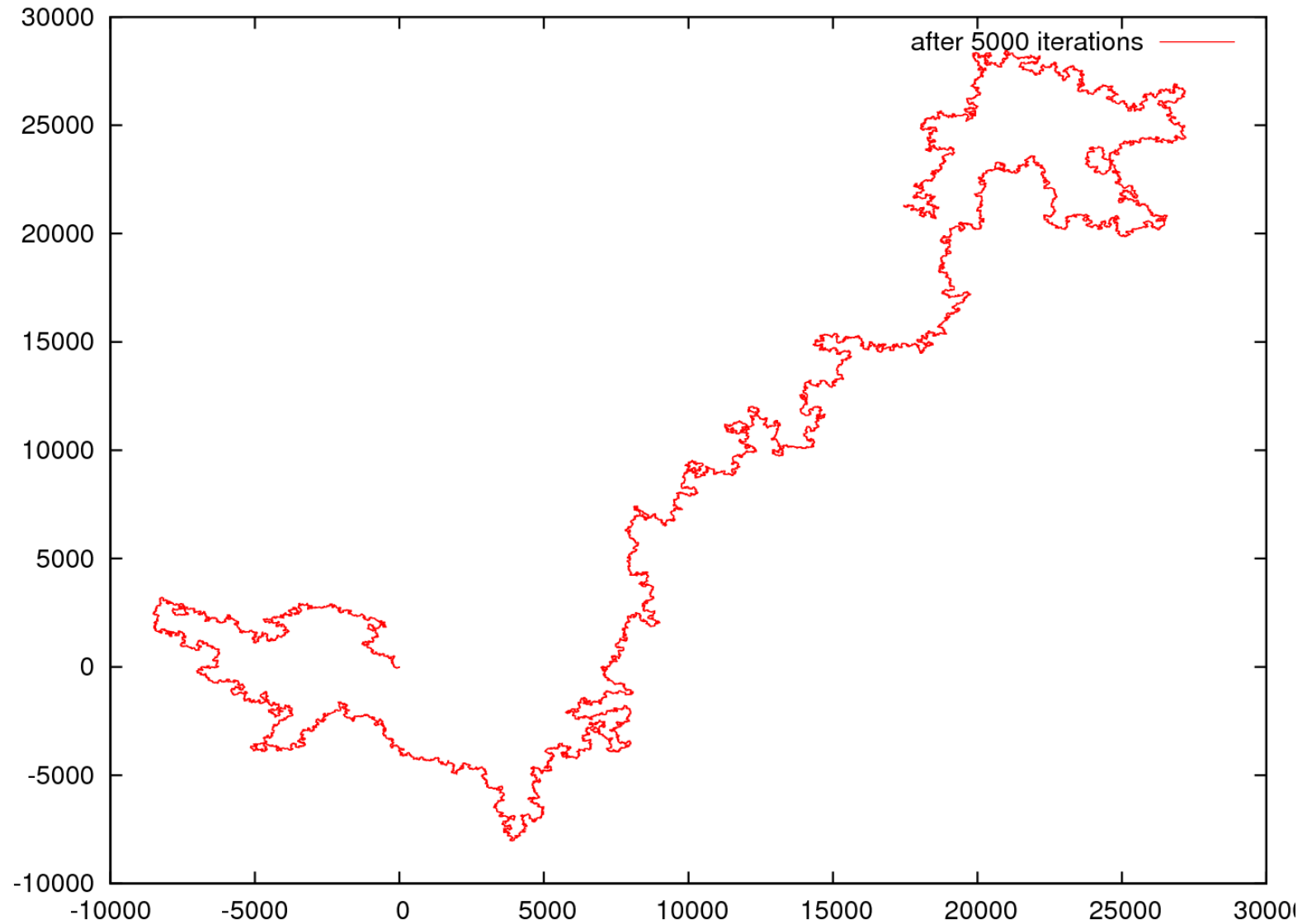
$N=10^6$ Thermalizing...



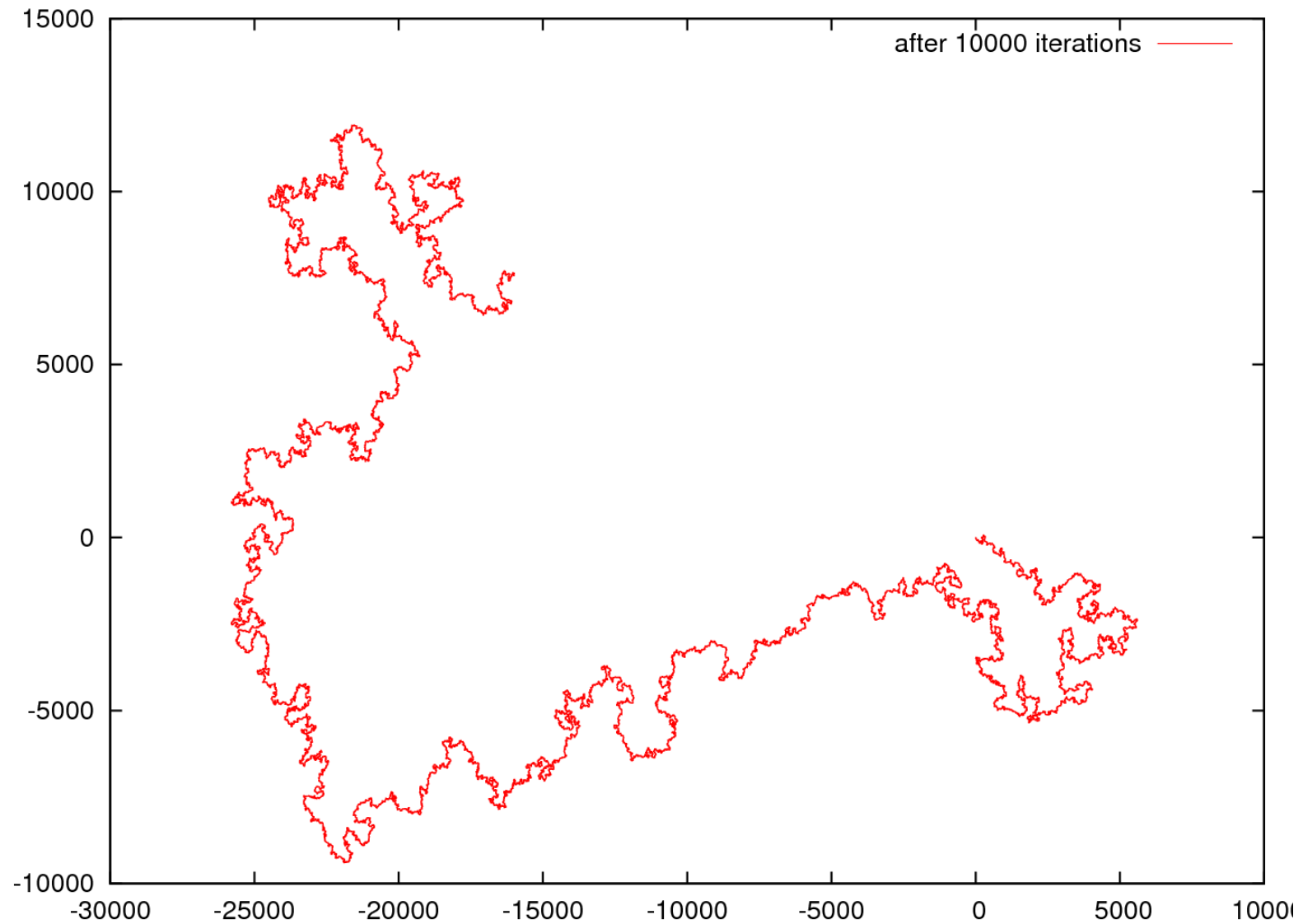
$N=10^6$ Thermalizing...



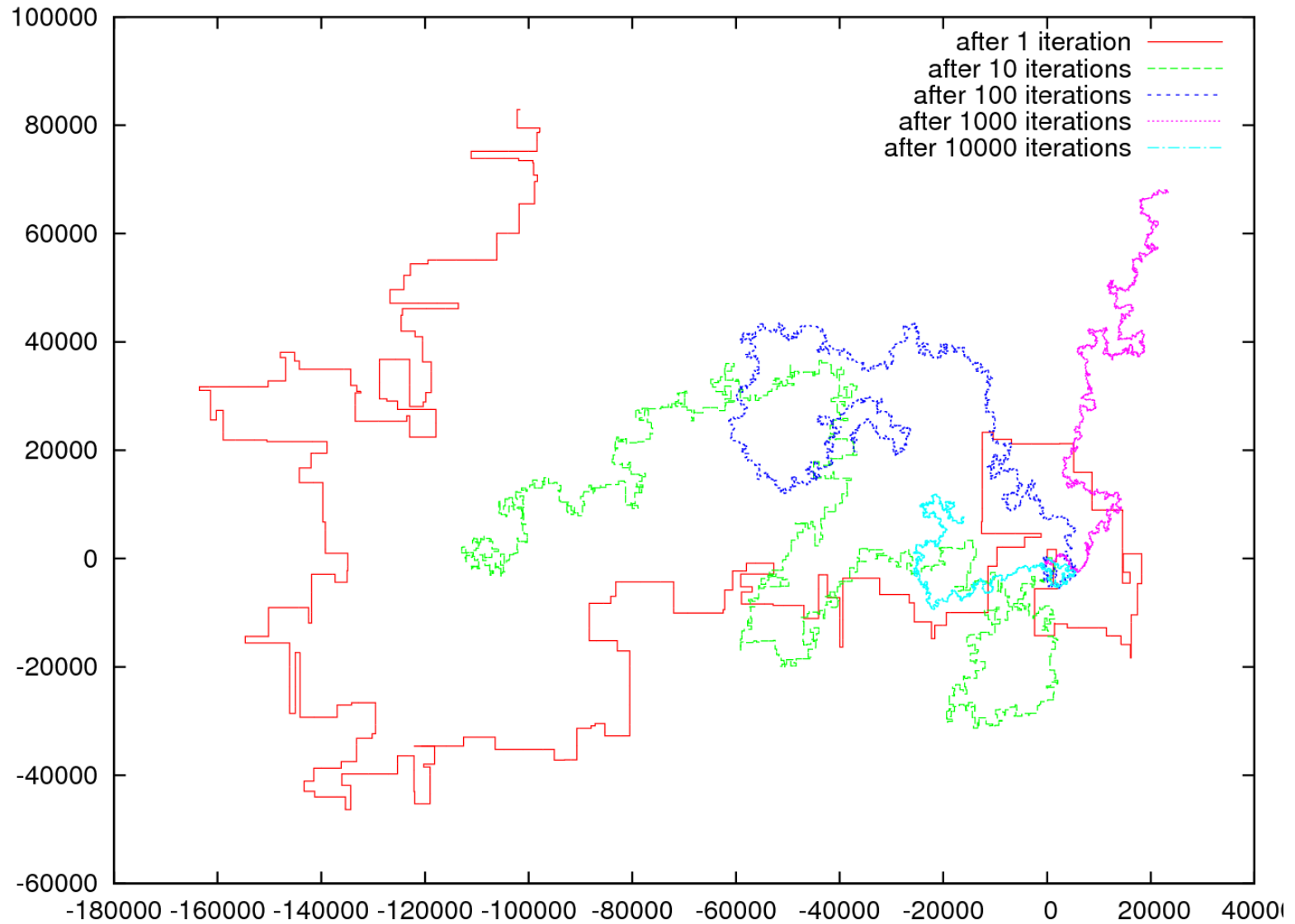
$N=10^6$ Thermalizing...



$N=10^6$ Thermalizing...



$N=10^6$ Thermalizing...



Simulations – PIVOT - ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

SQUARE

N	R^2	turn	Acceptance Ratio (%)
1,000	24,332(38)	0.61012(36)	25.353(15)
1,600	4,937(12) x 10	0.60887(52)	23.170(32)
2,500	9,638(19) x 10	0.60824(74)	21.229(32)
4,000	19,542(47) x 10	0.60901(38)	19.390(29)
6,400	39,330(88) x 10	0.61001(65)	17.674(21)
10,000	7,717(31) x 10 ²	0.60979(44)	16.264(26)
16,000	15,581(68) x 10 ²	0.61018(35)	14.846(30)
25,000	3,055(15) x 10 ³	0.60966(64)	13.619(32)
40,000	6,179(21) x 10 ³	0.60912(60)	12.481(27)
64,000	12,479(38) x 10 ³	0.60919(55)	11.395(22)
100,000	24,463(76) x 10 ³	0.60868(35)	10.512(20)

***ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ ΓΙΑ 5000 ITERATIONS
ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΙΣΟΡΡΟΙΑ***

HEXAGONAL

N	R^2	turn	Acceptance ratio (%)
1,000	28,079(70)	0.41884(24)	23.059(45)
1,600	5,669(11) x 10	0.41848(47)	20.848(25)
2,500	11,108(44) x 10	0.41880(49)	18.982(34)
4,000	22,376(73) x 10	0.41880(33)	17.152(19)
6,400	4,525(12) x 10 ²	0.41923(31)	15.539(21)
10,000	8,870(31) x 10 ²	0.41916(50)	14.213(17)
16,000	17,930(37) x 10 ²	0.41900(46)	12.843(19)
25,000	34,851(88) x 10 ²	0.41969(28)	11.656(26)
40,000	7,066(31) x 10 ³	0.41933(38)	10.563(17)
64,000	14,335(57) x 10 ³	0.41875(49)	9.575(29)
100,000	27,875(95) x 10 ³	0.41845(24)	8.689(15)

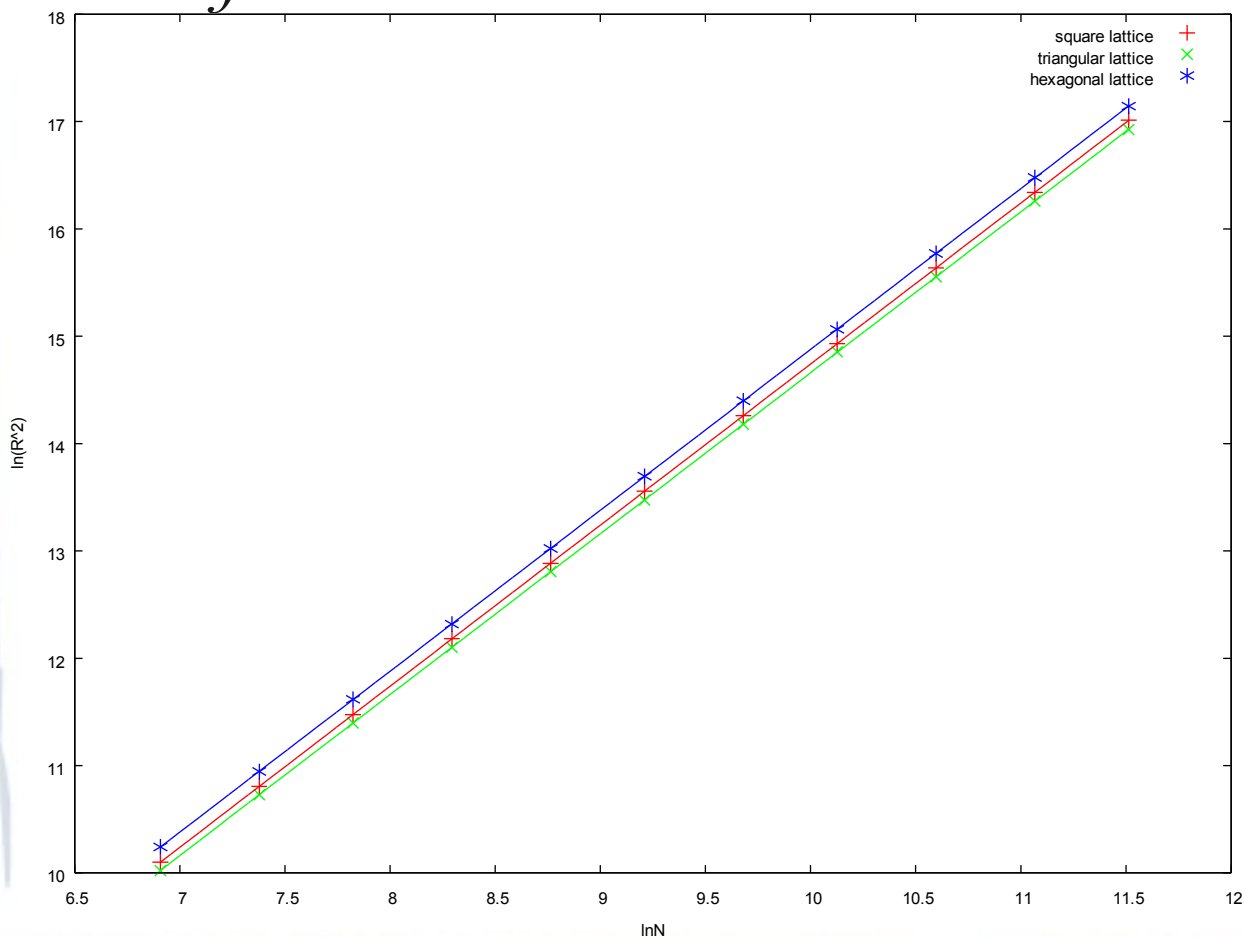
TRIANGULAR

N	R^2	turn	Acceptance ration (%)
1,000	22,525(39)	0.74924(48)	27.991(22)
1,600	45,628(84)	0.74862(41)	25.730(34)
2,500	8,910(21) x 10	0.74882(65)	23.845(32)
4,000	18,022(35) x 10	0.74950(61)	21.977(15)
6,400	36,526(98) x 10	0.74970(79)	20.282(29)
10,000	7,103(16) x 10 ²	0.74894(62)	18.746(27)
16,000	14,399(25) x 10 ²	0.74877(49)	17.327(23)
25,000	28,282(78) x 10 ²	0.74899(42)	16.121(19)
40,000	5,682(17) x 10 ³	0.74894(53)	14.896(20)
64,000	11,523(35) x 10 ³	0.74935(52)	13.787(33)
100,000	22,408(55) x 10 ³	0.74942(30)	12.811(25)

PIVOT – Κρίσιμος εκθέτης 2ν

$$\langle R^2 \rangle = AN^{2\nu}[1+O(N^{-4})] \quad N \rightarrow \infty, \quad \langle R^2 \rangle \sim AN^{2\nu}$$

fit: $\ln R^2 = \ln A + 2\nu \ln N$



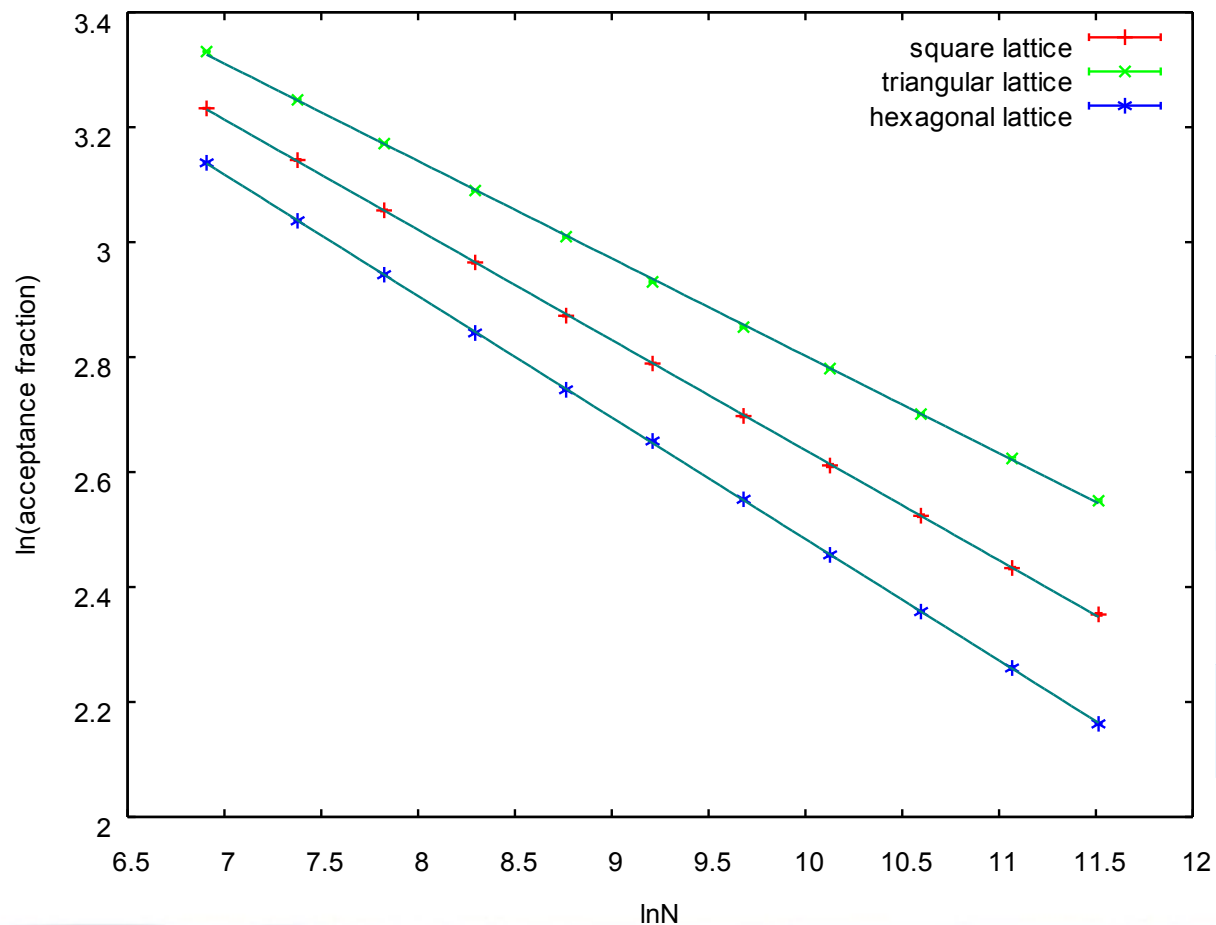
ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

lattice	2ν	A
<i>square</i>	1.5007(4)	0.767(3)
<i>triangular</i>	1.4992(5)	0.717(3)
<i>hexagonal</i>	1.4988(4)	0.895(4)

PIVOT – Κρίσιμος εκθέτης p

$$f \sim AN^{-p} \quad N \rightarrow \infty$$

$$\text{fit: } \ln f = \ln A - p \ln N$$



ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

lattice	p	A
<i>square</i>	0.1917(5)	95.1(4)
<i>triangular</i>	0.1695(7)	89.8(6)
<i>hexagonal</i>	0.2114(4)	99.2(3)

PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

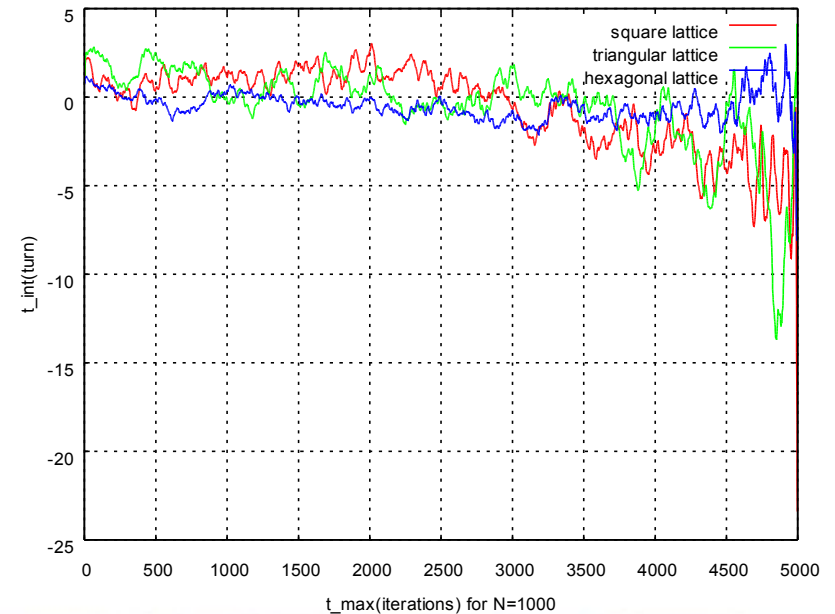
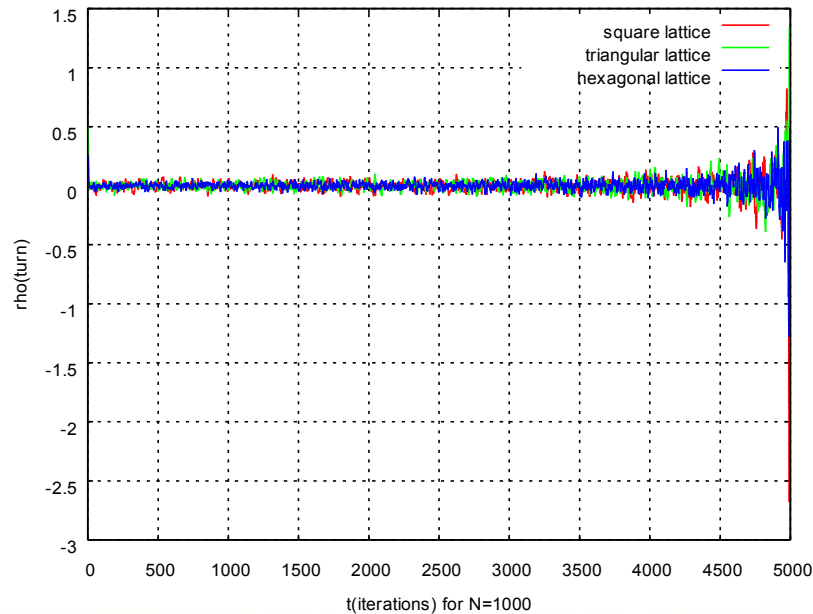
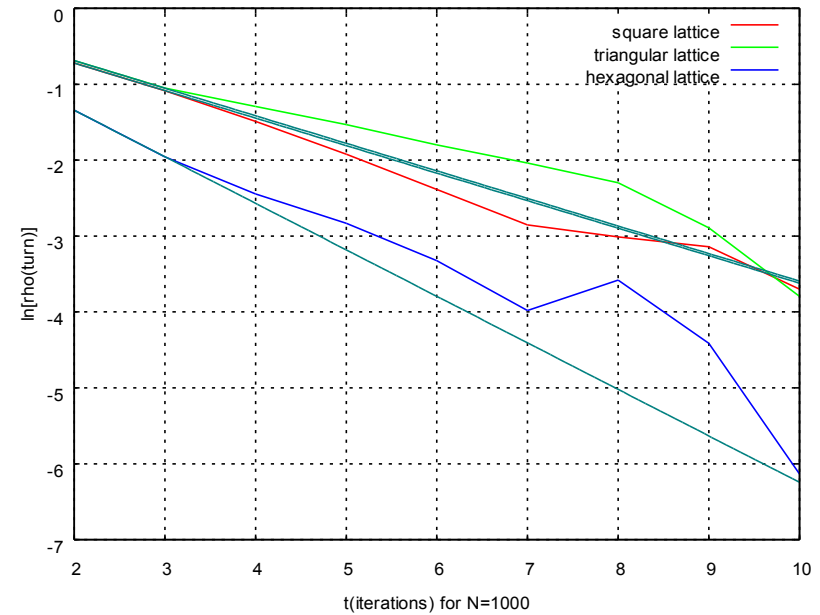
Εκτίμηση τ και τ_{int}

- τ : Παρεμβολή στο εκθετικό μέρος της $\rho \sim e^{-t/\tau}$. Οπότε $\tau = -1/slope$
- τ_{int} : Εκτίμηση ενός ελαχίστου από τη μέγιστη τιμή του

$$\tau_{int,Q} = \int_0^{+\infty} dt \rho_Q(t)$$

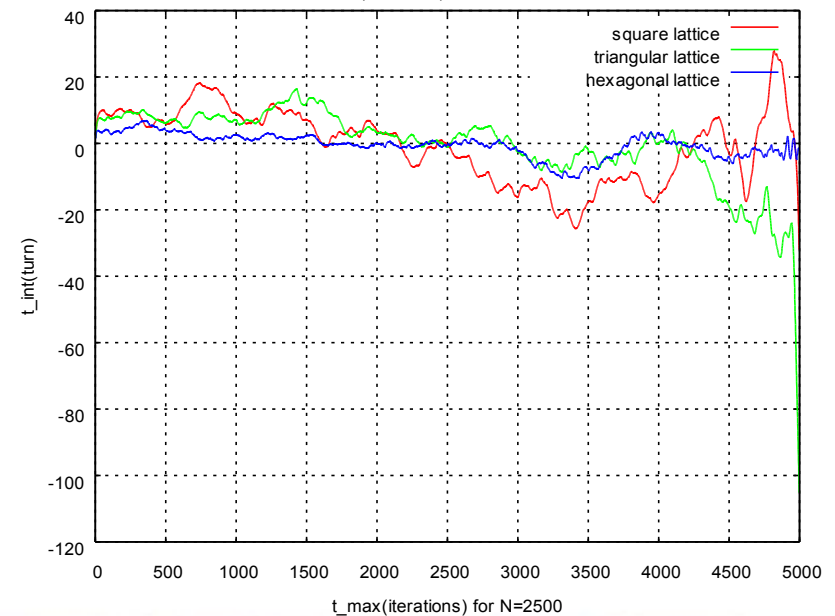
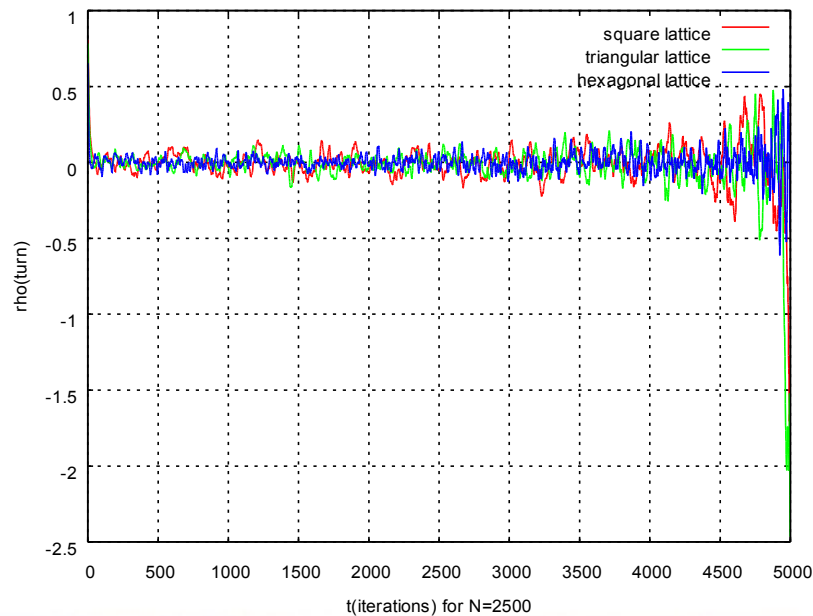
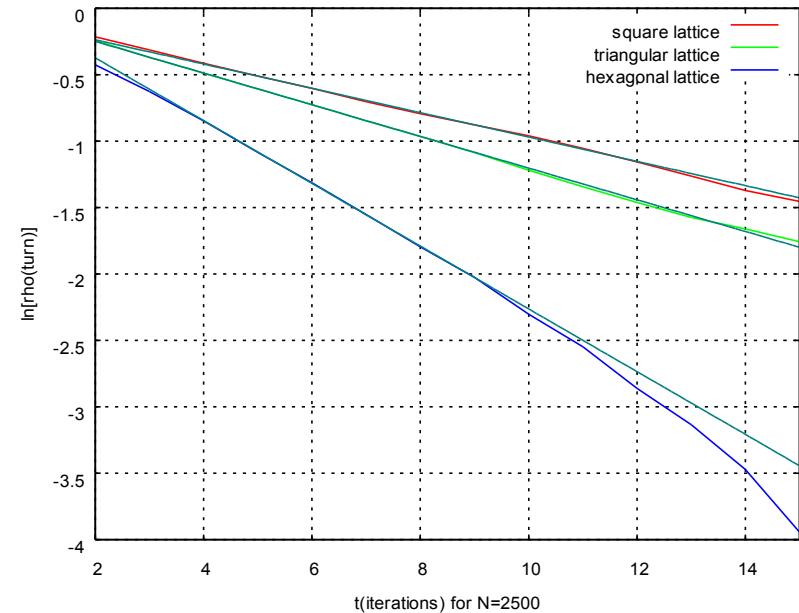
PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

N=1000		
lattice	τ	τ_{int}
<i>square</i>	2.8	2.2(1)
<i>triangular</i>	2.8	2.5(1)
<i>hexagonal</i>	1.6	1.2(2)



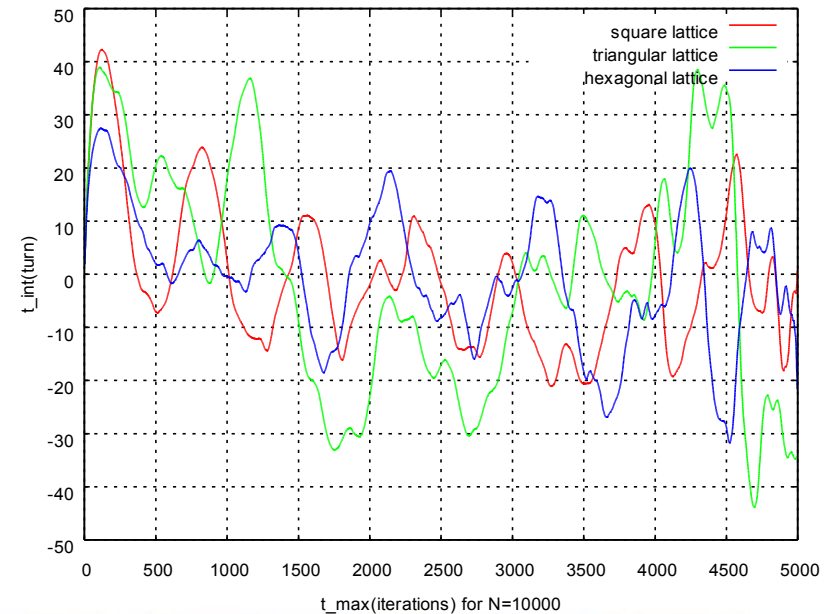
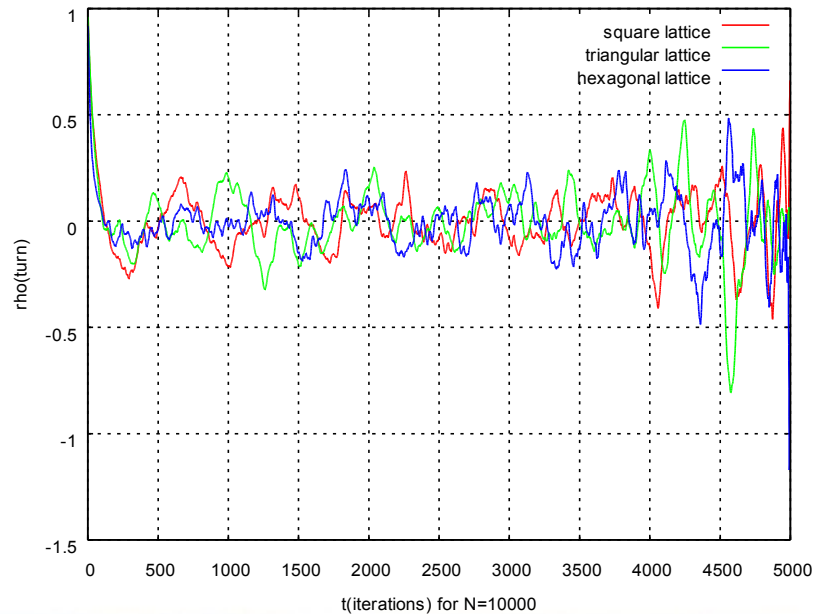
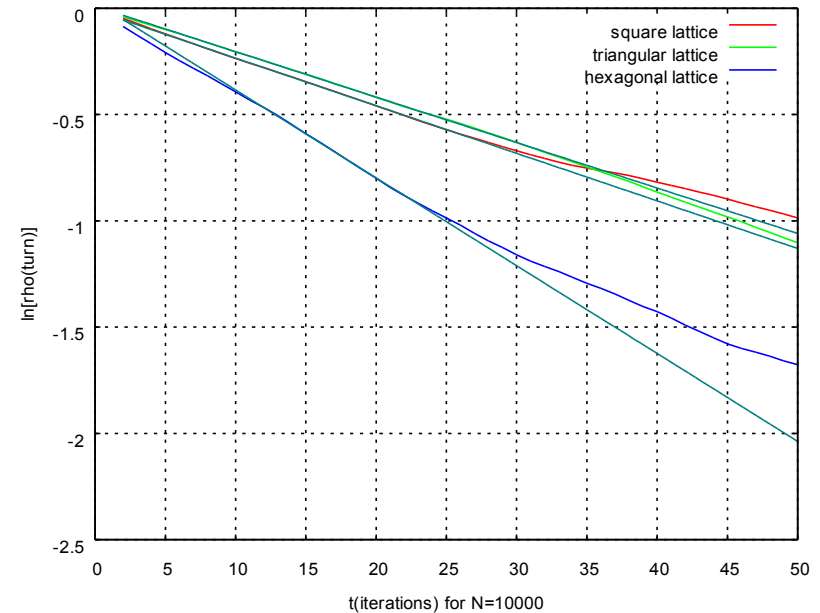
PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

N=2500		
lattice	τ	τ_{int}
<i>square</i>	10.4	25(5)
<i>triangular</i>	8.4	17(2)
<i>hexagonal</i>	4.3	7(2)



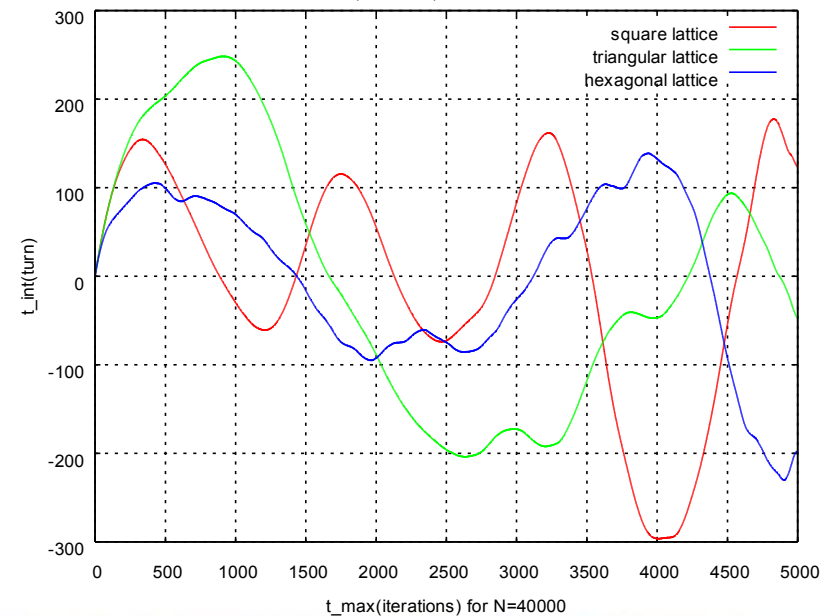
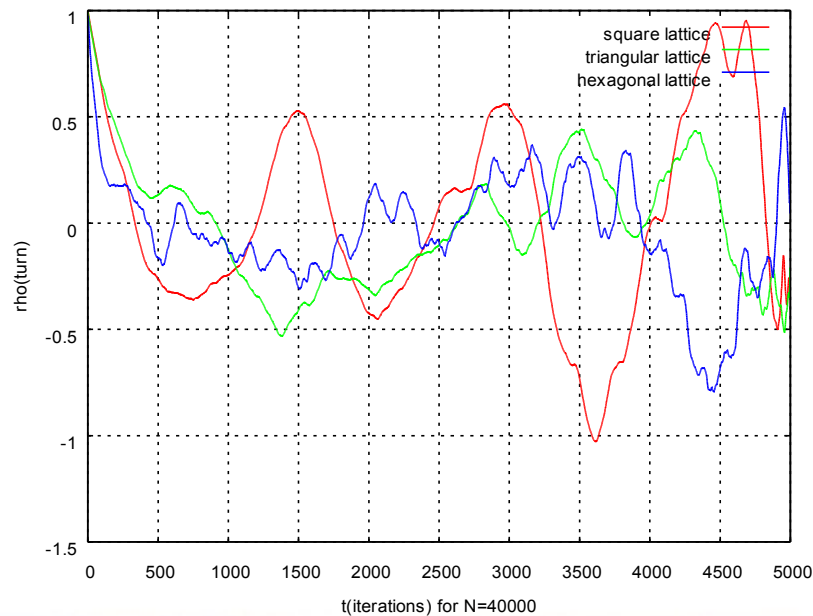
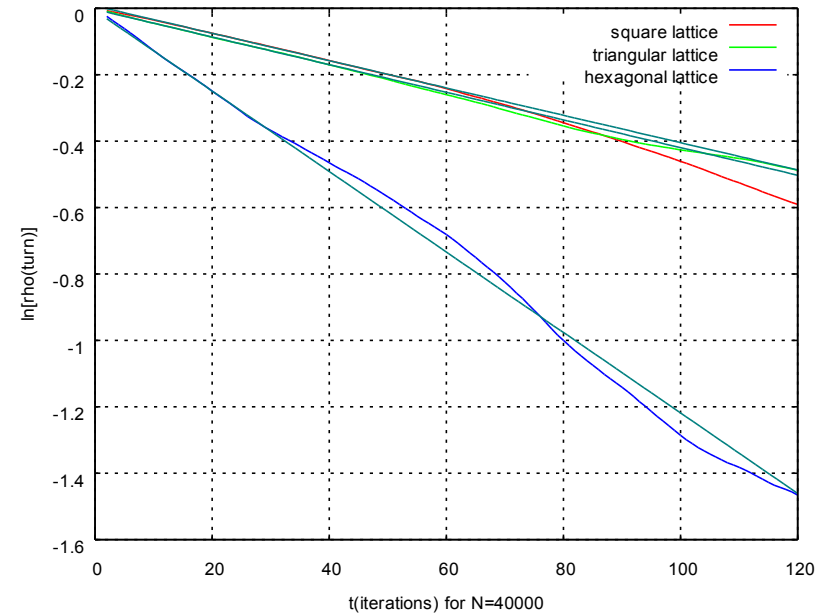
PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

N=10000		
lattice	τ	τ_{int}
<i>square</i>	45	43(2)
<i>triangular</i>	47	38(2)
<i>hexagonal</i>	27	27(2)



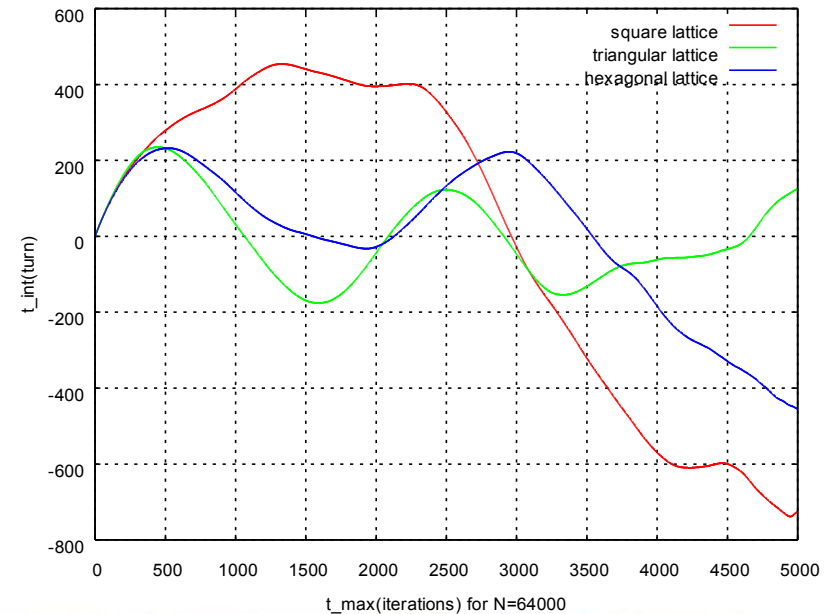
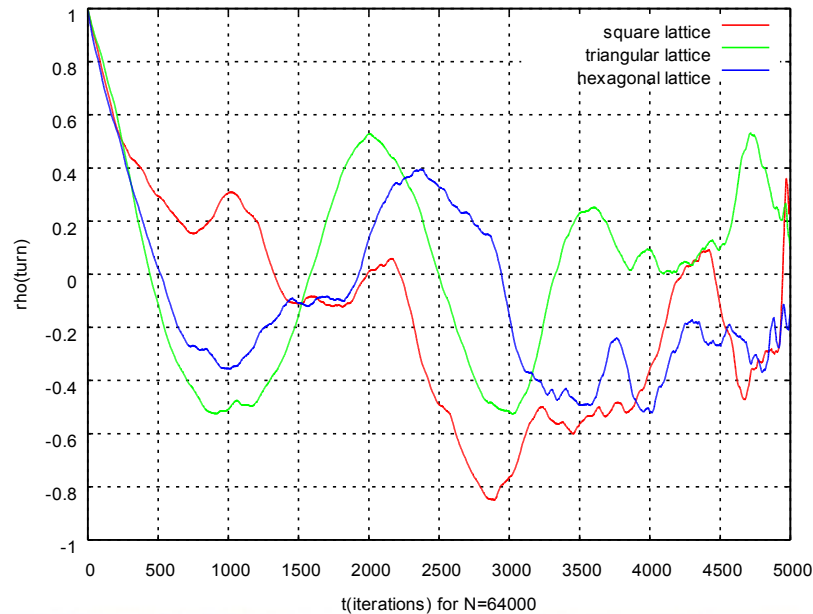
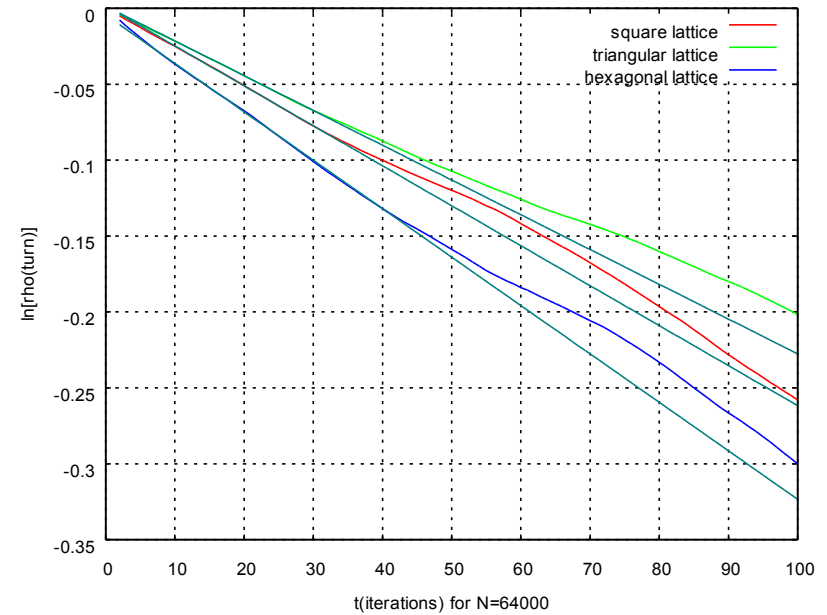
PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

N=40000		
lattice	τ	τ_{int}
<i>square</i>	250	175(10)
<i>triangular</i>	243	245(10)
<i>hexagonal</i>	84	140(2)



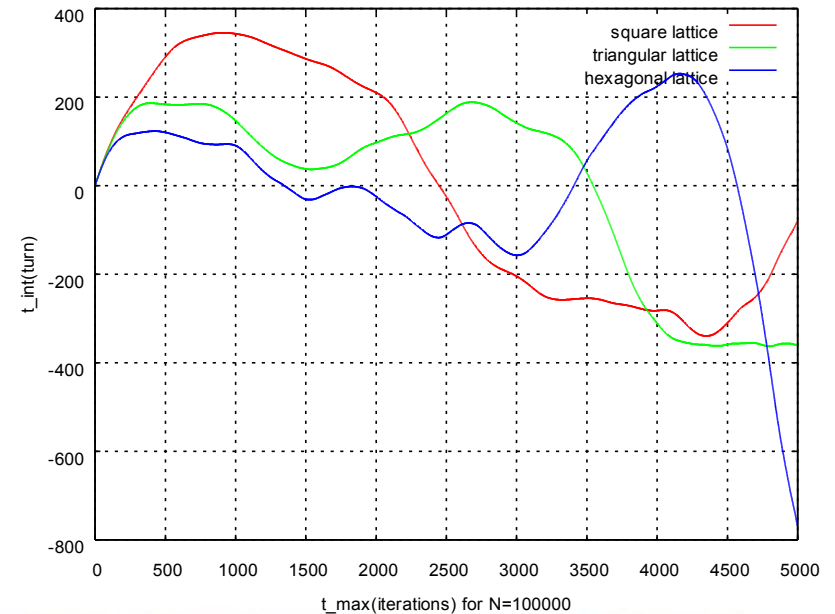
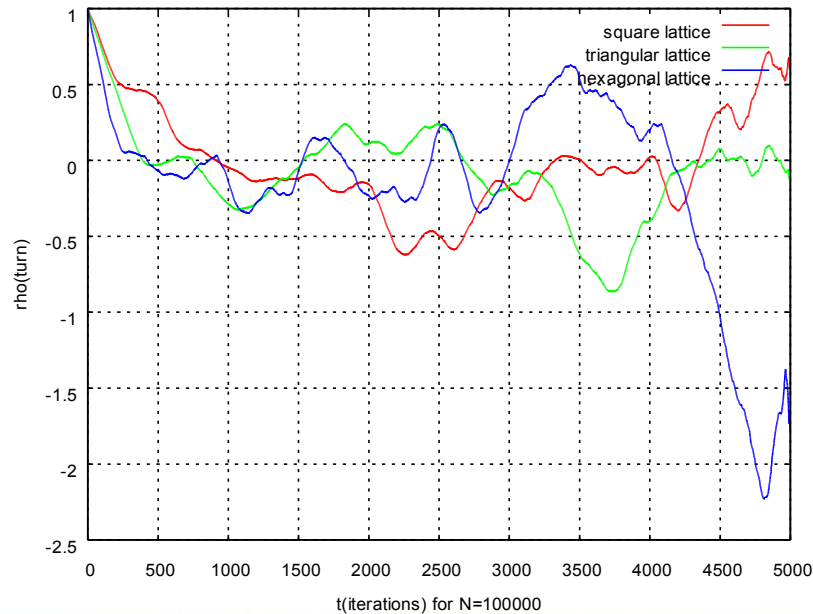
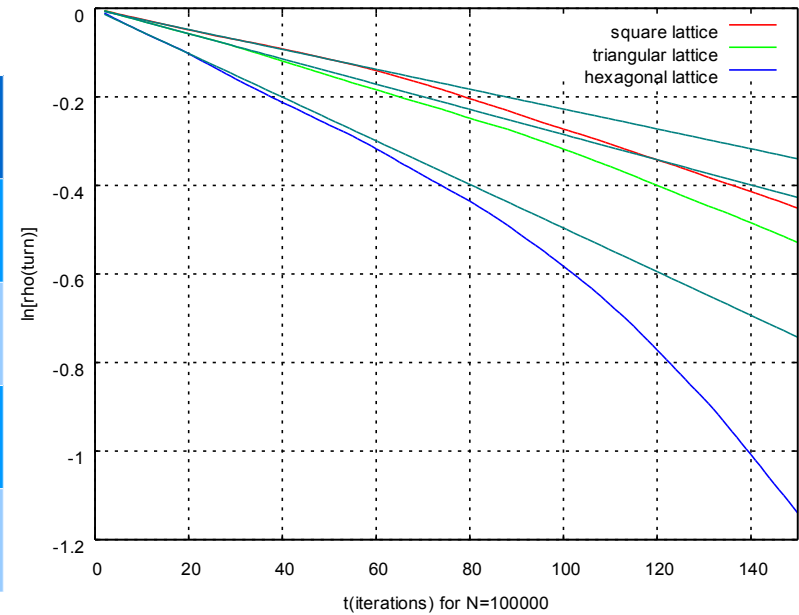
PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

N=64,000		
lattice	τ	τ_{int}
<i>square</i>	382	450(15)
<i>triangular</i>	437	230(20)
<i>hexagonal</i>	321	230(20)



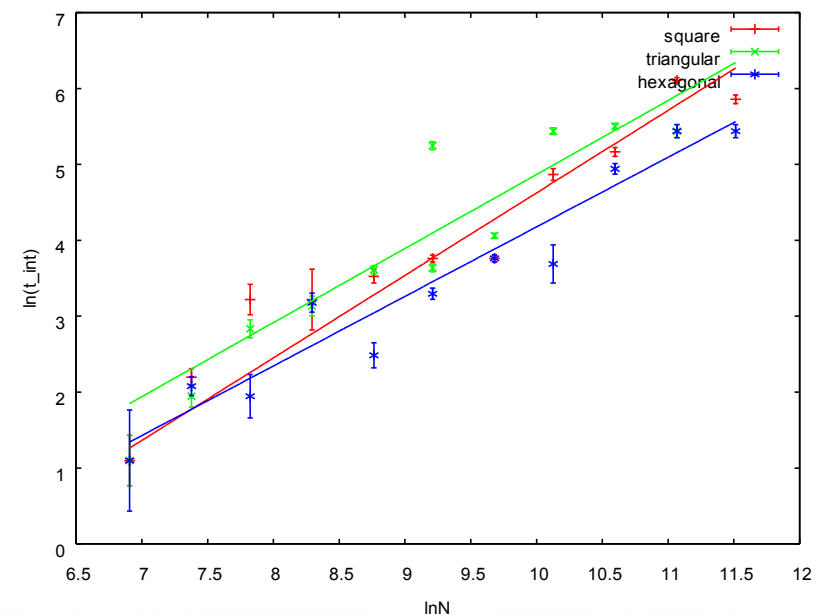
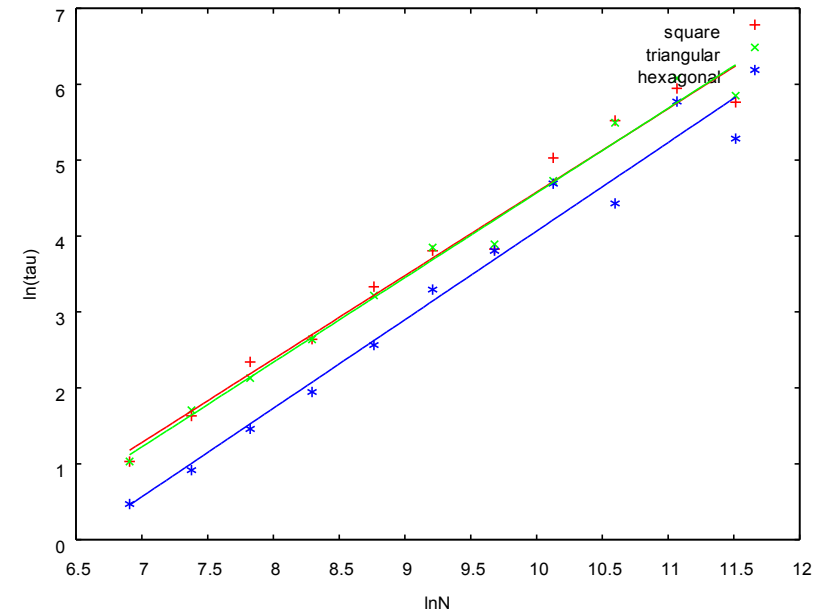
PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

N=100,000		
lattice	τ	τ_{int}
<i>square</i>	318	350(20)
<i>triangular</i>	347	190(10)
<i>hexagonal</i>	197	320(20)



PIVOT – Εκτίμηση Αυτοσυσχετισμού

N	square		triangular		hexagonal	
	τ	τ_{int}	τ	τ_{int}	τ	τ_{int}
1,000	2.8	3(1)	2.8	3(1)	1.6	3(2)
1,600	5.1	9(1)	5.5	7(1)	2.5	8(1)
2,500	10.4	25(5)	8.4	17(2)	4.3	7(2)
4,000	14	25(10)	14	23(3)	7	24(3)
6,400	28	34(3)	25	37(2)	13	12(2)
10,000	45	43(2)	47	38(2)	27	27(2)
16,000	46	43(2)	49	58(2)	45	43(2)
25,000	153	130(10)	113	230(10)	109	40(10)
40,000	250	175(10)	243	245(10)	84	140(10)
64,000	382	450(15)	437	230(20)	321	230(20)
100,000	318	350(20)	347	190(10)	197	230(20)



	square	triangular	hexagonal
$p(\tau)$	1.10(6)	1.05(6)	1.17(7)
$p(\tau_{int})$	1.09(2)	0.98(2)	0.92(3)

$$p_{\text{square}} \approx 0.19$$

$$p_{\text{triangular}} \approx 0.17$$

$$p_{\text{hexagonal}} \approx 0.21$$

Αναμενόμενες τιμές

Simulations - PIVOT

ΑΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ

lattice	2v	p = f(f)	p = f(τ)	p = f(τ_{int})
<i>square</i>	1.5007(4)	0.1917(5)	1.10(6)	1.09(2)
<i>triangular</i>	1.4992(5)	0.1695(7)	1.05(6)	0.98(2)
<i>hexagonal</i>	1.4988(4)	0.2114(4)	1.17(7)	0.92(3)

2v επιβεβαιώνεται

p(f) επιβεβαιώνεται

p(τ) αποτυχία...

p(τ_{int}) αποτυχία...

SIMPLE SAMPLING VS PIVOT

SIMPLE SAMPLING

- 1) Περιορισμός στο μήκος
- 2) Εκθετική δυσκολία για παραγωγή μεγάλων περιπτώσεων
- 3) Όχι thermalization
- 4) Μεγάλος όγκος δεδομένων
- 5) Ιδιαίτερα χρονοβόρο

PIVOT ALGORITHM

- 1) Μέχρι πολύ μεγάλα μήκη
- 2) Εμείς ορίζουμε το μήκος του περιπάτου εξ' αρχής
- 3) Χρόνος για thermalization
- 4) Μικρός όγκος δεδομένων
- 5) Αξιοσημείωτα γρήγορο