

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PISA
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA IN FISICA
A. A. 1997/98

TESI DI LAUREA

METODI MONTE CARLO
PER IL
SELF-AVOIDING WALK INTERAGENTE

CANDIDATO
Mauro PAPINUTTO

RELATORE
Prof. Sergio CARACCIOLO

Ai miei genitori

Prefazione

Nella teoria moderna dei fenomeni critici e delle transizioni di fase, un ruolo fondamentale viene giocato dal fenomeno dell'universalità. In pratica i sistemi di meccanica statistica in regime critico sono suddivisi in un certo numero di classi di universalità, caratterizzate tipicamente dalla dimensione spaziale, dalle simmetrie, dal range dell'interazione e da altre proprietà generali. Nella vicinanza del punto critico, il comportamento asintotico dominante è *esattamente* lo stesso per tutti i sistemi di una data classe di universalità, ovvero governato da esponenti critici universali. I dettagli microscopici, come ad esempio la forma specifica dell'interazione, il tipo di struttura reticolare, sono completamente irrilevanti, eccetto che per il computo dei fattori di scala non universali. Di conseguenza, per studiare le caratteristiche universali di un sistema d'interesse anche molto complesso, è sufficiente trovare un modello matematico, il più semplice possibile, che appartenga alla stessa classe di universalità. Le fonti d'errore per le quantità universali saranno, in tale modo, solo quelle che derivano dalle approssimazioni introdotte nella risoluzione del modello matematico, mentre, non saranno presenti approssimazioni dovute al fatto che il modello usato non può corrispondere esattamente al sistema fisico di partenza.

Il Self-Avoiding Walk, ovvero un cammino aleatorio che congiunge siti primi vicini di un reticolo senza visitare alcun sito più di una volta, è stato introdotto fin dagli anni '50 come modello per polimeri in “buon” solvente. Nonostante le sue estreme semplificazioni, alla luce di quanto appena detto esso appare oggi, non semplicemente un buon modello, ma un modello *perfetto* per lo studio di alcuni aspetti della fisica dei polimeri. Introducendo nel SAW un'interazione fra primi vicini non consecutivi, si ottiene un modello per la transizione di fase fra polimeri in un “buon” solvente e polimeri in un solvente “povero” (anche nota col nome di transizione θ), che chiameremo nel seguito ISAW (la qualità del solvente corrisponde nell' ISAW all'intensità dell'interazione). I risultati analitici ottenuti fino ad oggi per questi due modelli sono stati ottenuti con metodi di gruppo di rinormalizzazione, sfruttando la corrispondenza fra modelli di polimeri e teoria dei campi. Questi comprendono, in $d = 2$, tecniche di invarianza conforme e di gas di Coulomb che permettono la risoluzione esatta di modelli ai quali si arriva con una serie di equivalenze più o meno approssimate, che partono dal modello d'interesse. L'ipotesi fondamentale, non sempre verificata rigorosamente, è naturalmente che il modello iniziale e quello finale appartengano alla stessa classe di universalità. Mentre in $d = 2$ si ottengono anche risultati esatti (seppur non rigorosi), in $d = 3$ si riescono ad effettuare solo sviluppi basati su tecniche di ε -expansion o g -expansion, che non permettono sempre calcoli ad alta precisione.

Molto lavoro è stato quindi fatto nello sviluppo di metodi numerici, con lo scopo di ottenere risultati più precisi di quelli analitici approssimati, e di verificare le assunzioni

e le derivazioni formali per le quali mancano controlli rigorosi. I metodi numerici si dividono fondamentalmente in: *enumerazioni esatte* e *metodi Monte Carlo*. Questi ultimi si basano sulla generazione di campioni casuali e permettono di investigare il regime di cammini abbastanza lunghi (di solito $N \sim 10^2 - 10^5$), sufficientemente vicino al regime asintotico da permettere estrapolazioni ragionevoli. Negli ultimi venti anni c'è stato un grande progresso nella scoperta di nuovi e più efficienti algoritmi che hanno permesso di abbassare il tempo di CPU necessario per generare SAWs di N passi "effettivamente indipendenti" da $\sim N^{3.2}$ a $\sim N^2$ o anche $\sim N$ (con l'algoritmo *pivot*). L'introduzione dell'interazione, che negli algoritmi Monte Carlo si traduce in un *test Metropolis*, causa un notevole rallentamento degli algoritmi altamente non locali, classe alla quale appartengono tutti gli algoritmi più efficienti. Allo stesso tempo però le mosse non locali aumentano la velocità di decorrelazione delle configurazioni generate in successione.

In questa tesi ci occupiamo, dello studio, dal punto di vista teorico e numerico, di nuovi algoritmi che mantengano la loro efficienza in presenza di interazione ed i contributi originali sono contenuti nei capitoli 3,4,6.

Nel primo capitolo, dopo una breve introduzione sui fenomeni critici, viene proposta un' introduzione generale sui cammini aleatori, che costituiscono un ottimo modello per lo studio della fisica dei polimeri. In particolare viene messa in luce la corrispondenza fra i modelli per i polimeri in un "buon" solvente (SAW, modello standard) e teorie di campo continuate analiticamente per numero di componenti $n \rightarrow 0$ (modello σ non lineare e teoria $\lambda\phi^4$).

Nel secondo capitolo si introducono i metodi di analisi statistica indispensabili per estrarre informazioni dai dati Monte Carlo, nel caso di simulazioni statiche ed in quello di simulazioni dinamiche. Vengono inoltre descritti e classificati gli algoritmi dinamici più importanti utilizzati nello studio del SAW, fornendo le basi necessarie per poter affrontare, nel capitolo successivo, lo studio teorico di nuovi algoritmi che si mantengano efficienti anche in presenza di interazione. Essi si dividono in: algoritmi locali, bilocali, non locali.

Nel terzo capitolo, viene dimostrata rigorosamente l'ergodicità per due nuovi algoritmi in $d = 2$, e per un terzo in $d \geq 2$. Questi sono costituiti da mosse locali e bilocali, mentre, per i motivi detti sopra, non contengono mosse globali che, nel caso dell' ISAW, perdono gran parte della loro efficienza. Si passa poi alla determinazione della matrice di transizione che caratterizza la realizzazione pratica degli algoritmi dinamici.

Nel quarto capitolo si effettua, grazie all'elevata statistica raccolta, uno studio accurato ed originale del comportamento dinamico dei due algoritmi implementati nella pratica, che, nel limite di $N \rightarrow \infty$, rappresentano un sistema dinamico in regime critico. Particolare attenzione è rivolta alle loro proprietà universali come gli esponenti dinamici dei tempi di autocorrelazione integrato ed esponenziale, che contrariamente a quanto assunto di solito, non sono generalmente uguali. Viene quindi effettuato uno studio sistematico delle funzioni di autocorrelazione per le osservabili misurate, con particolare riguardo alle loro proprietà di scala.

Nel quinto capitolo, dopo una breve introduzione sul punto critico θ , si riportano i risultati esatti per gli esponenti critici in $d = 2$ ottenuti da Saleur e Duplantier [1] e si ricavano teoricamente risultati riguardanti la forma della funzione di distribuzione della distanza fra gli estremi del cammino e la probabilità che un estremo sia primo vicino del cammino stesso.

Questi ultimi sono investigati nel sesto capitolo per mezzo di una simulazione nell'immediata vicinanza del punto critico in $d = 2$. Si effettua prima di tutto l'analisi del comportamento dinamico, confrontandone i risultati con quelli delle simulazioni in assenza di interazione discussi nel capitolo 4. Si passa poi allo studio, fino ad ora mai effettuato al punto θ , di alcune caratteristiche di statica tra cui la funzione di distribuzione di cui sopra, varie grandezze legate al tensore di girazione che descrivono la forma di un cammino e la probabilità che un estremo sia primo vicino del cammino stesso. Tali grandezze danno, tra l'altro, un controllo delle previsioni teoriche per gli esponenti critici al punto θ , riportate nel capitolo precedente.

In conclusione di questo lavoro, desidero ringraziare il Prof. Andrea Pelissetto per i fondamentali contributi riguardanti le dimostrazioni di ergodicità e per il costante aiuto offertomi, ed il Prof. Sergio Caracciolo per avermi seguito e consigliato durante tutto il lavoro di tesi.

Vorrei ringraziare inoltre la Dott. Maria Serena Causo per i consigli e gli aiuti nella fase preliminare, e Massimiliano, Roberto e Giovanni per gli importanti contributi di carattere tecnico-pratico.

Indice

Prefazione	v
1 Proprietà critiche dei polimeri	3
1.1 Fenomeni critici e ipotesi di scala	3
1.2 Polimeri: proprietà fisiche	7
1.3 Polimeri e teoria dei campi	10
1.3.1 Random Walk e modello gaussiano	10
1.3.2 Self-avoiding walk e modello σ	14
1.4 Proprietà generali dei cammini aleatori	15
1.5 Modello standard e teoria $\lambda\phi^4$	22
1.6 Risultati esatti per il SAW in $d = 2$	24
2 Algoritmi Monte Carlo per il SAW	27
2.1 Metodi Monte Carlo Statici	27
2.2 Metodi Monte Carlo Dinamici	30
2.3 Algoritmi Dinamici per il SAW	36
2.3.1 Algoritmi Locali	39
2.3.2 Algoritmi Bilocali	41
2.3.3 Algoritmi Non Locali	42
3 Algoritmi Bilocali	45
3.1 Ergodicità per l'algoritmo Bilocal	45
3.2 Ergodicità per l'algoritmo Satyr	55
3.3 Ergodicità per l'algoritmo Reptation modificato	59
3.4 Studio teorico dell' algoritmo Bilocal	60
3.5 Studio teorico dell' algoritmo Satyr	62
4 Risultati numerici a $\beta = 0$	67
4.1 Programmi utilizzati	68
4.2 Bilocal più Reptation in $d = 2$ ed in $d = 3$	69
4.3 Bilocal più satyr in $d = 2$	80
5 Polimeri al punto θ in $d = 2$	87
5.1 Punto Critico θ : risultati esatti in $d = 2$	90
5.2 Distanza estremo-estremo	92

6	Simulazioni numeriche al punto θ in $d = 2$	99
6.1	Punto θ : caratteristiche generali	99
6.2	Comportamento dinamico dell'algoritmo	102
6.3	Distribuzione estremo-estremo	104
6.4	Forma dei polimeri	111
	Conclusioni e prospettive	115
	Bibliografia	119

Capitolo 1

Proprietà critiche dei polimeri

La fisica dei polimeri con elevato grado di polimerizzazione è una manifestazione tipica dell'universalità. Le proprietà delle catene, quando la loro lunghezza tende all'infinito, sono caratterizzate da quantità (esponenti critici e rapporti di ampiezze) che non dipendono dai dettagli del sistema. Inoltre le stesse proprietà sono condivise da un grande numero di sistemi, che possono essere anche molto differenti da un sistema di polimeri. In questo capitolo definiremo i modelli che verranno studiati nei capitoli successivi e approfondiremo, in particolare, quelli che appartengono alla stessa classe di universalità dei polimeri in un buon solvente, introducendo, a tale fine, metodi di teoria dei campi utili per studiarne il comportamento critico.

1.1 Fenomeni critici e ipotesi di scala

Presentiamo una breve introduzione sulle transizioni di fase e sulla loro classificazione. Un esempio molto noto è quello della transizione ferromagnetica nei materiali magnetici. In questi materiali esiste una temperatura T_C al di sotto della quale è presente una magnetizzazione spontanea che viene persa quando il materiale viene riscaldato sopra T_C . Al punto di transizione, varie quantità termodinamiche, come ad esempio l'energia libera o il calore specifico, sono discontinue o non analitiche. Tradizionalmente le transizioni di fase sono classificate in due gruppi a seconda del comportamento dell'energia libera al punto critico. Il primo è costituito dalle *transizioni del primo ordine* che sono quelle in cui c'è una discontinuità nelle derivate prime dell'energia libera; il secondo, che chiameremo genericamente *fenomeni critici*, è costituito da quelle del secondo ordine o d'ordine più elevato le quali mostrano rispettivamente discontinuità nelle derivate seconde o in quelle di ordine superiore (per esempio la transizione ferromagnetica è del secondo ordine). Le transizioni appartenenti al secondo gruppo, contrariamente a quelle del primo, mostrano, in una piccola regione dello spazio dei parametri attorno al punto critico, un comportamento universale che non dipende dai parametri microscopici del modello, ma solo da alcune caratteristiche generali.

Per spiegare i concetti di criticità e di universalità, consideriamo uno dei più semplici modelli che mostrano un comportamento critico, il modello di Ising. Esso rappresenta un'approssimazione piuttosto cruda dei ferromagneti uniassiali, è esattamente risolubile in $d = 2$ e dà un esempio di sistema critico con esponenti critici diversi da quelli predetti con teorie di campo medio. Consideriamo un reticolo regolare ed assegniamo ad ogni sito

i una variabile di spin S_i che assuma i valori ± 1 . L'Hamiltoniana è data da

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \sum_i S_i \quad (1.1)$$

dove la prima somma è fatta su tutte le coppie di siti primi vicini e la seconda su tutti i siti del reticolo. Possiamo allora definire la funzione di partizione come

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} \quad (1.2)$$

($\beta = 1/T$) e l'energia libera per unità di volume è

$$F = -\frac{1}{\beta V} \log Z \quad (1.3)$$

Varie funzioni termodinamiche possono essere definite in termini dell'energia libera: ad esempio l'energia interna per unità di volume

$$U \equiv \frac{1}{V} \langle H(h=0) \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F) \quad (1.4)$$

o il calore specifico a campo magnetico fissato

$$C_{h,sing} \equiv \frac{\partial U}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} (\beta F). \quad (1.5)$$

Analogamente la magnetizzazione media per sito è data da

$$M \equiv \langle S_i \rangle = -\frac{\partial F}{\partial h} \quad (1.6)$$

e la suscettività magnetica

$$\chi \equiv \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \quad (1.7)$$

Se si considera la teoria definita da (1.1) e (1.2) su un reticolo finito con condizioni al bordo fissate, la funzione di partizione si ottiene con una somma finita e quindi tutte le quantità appena definite sono finite ed analitiche in T e in H . La non-analiticità appare solo nel limite termodinamico di volume infinito. In questo caso è possibile che in alcune regioni dello spazio dei parametri (T, h) le derivate dell'energia libera, e quindi le quantità derivate da esse, mostrino discontinuità o divergenze. Questo succede, ad esempio, proprio nel modello di Ising. Per $h = 0$ c'è un valore critico della temperatura che separa la fase in cui $M = 0$ ($T > T_c$) dalla fase di magnetizzazione spontanea ($T < T_c$). La linea $h = 0$ nella fase di bassa temperatura è costituita, inoltre, da punti di transizione di prima specie dato che, quando h cambia segno, la magnetizzazione M mostra una discontinuità. A noi interessa, comunque, il punto $T = T_c$ e $h = 0$ che è un vero punto critico nella vicinanza del quale si manifestano le caratteristiche di universalità. In un certo suo intorno, le grandezze termodinamiche hanno un andamento a potenza del tipo

$$M \sim (T - T_c)^\beta \quad \text{per } T \rightarrow T_c^-, h = 0 \quad (1.8)$$

$$M \sim h^{1/\delta} \quad \text{per } T = T_c, h \rightarrow 0 \quad (1.9)$$

$$\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma} \quad \text{per } T \rightarrow T_c^+, h = 0 \quad (1.10)$$

$$\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma'} \quad \text{per } T \rightarrow T_c^-, h = 0 \quad (1.11)$$

$$C_{h,sing} \sim (T - T_c)^{-\alpha} \quad \text{per } T \rightarrow T_c^+, h = 0 \quad (1.12)$$

$$C_{h,sing} \sim (T - T_c)^{-\alpha'} \quad \text{per } T \rightarrow T_c^-, h = 0 \quad (1.13)$$

dove $\alpha, \alpha', \gamma, \gamma'$ e δ sono esponenti critici. Per il modello di Ising tridimensionale essi sono stati calcolati numericamente ottenendo

$$\alpha = \alpha' \approx 0.11, \quad \beta \approx 0.326, \quad \gamma = \gamma' \approx 1.24, \quad \delta \approx 4.80 \quad (1.14)$$

Quasi tutti i sistemi, in un intorno del punto critico, mostrano un comportamento del tipo (1.8-1.13). La forza di questo risultato sta nell' universalità del valore degli esponenti critici (1.14). Infatti lo stesso valore è stato trovato sperimentalmente per una varietà di ferromagneti uniassiali. Se adesso consideriamo come secondo esempio un modello di liquido-gas definito su reticolo ipercubico d -dimensionale in cui viene assunto un potenziale molecolare a corto range e con hamiltoniana

$$H = -4J \sum_{\langle ij \rangle} \rho_i \rho_j + \mu \sum_i \rho_i \quad (1.15)$$

dove $\rho_i = 0, 1$ a seconda che il sito sia vuoto o occupato da una molecola e dove μ è il potenziale chimico. Se definiamo una nuova variabile $S_i = 2\rho_i - 1$, che assume i valori ± 1 , e la sostituiamo nella (1.15) otteniamo la stessa forma dell' hamiltoniana di Ising con $h = 4dJ + \mu/2$. Per $\mu = -8dJ$ ($h = 0$) c'è una temperatura critica che separa una fase gassosa dove $\langle \rho_i \rangle = 1/2$ ($T > T_c$) da una liquida dove $|\langle \rho_i \rangle - \frac{1}{2}| > 0$ ($T < T_c$). In vicinanza del punto critico le quantità termodinamiche d'interesse per il sistema gas-liquido (densità, compressibilità isoterma, calore specifico) hanno un andamento a potenza del tipo (1.8-1.13), e si verifica sperimentalmente (entro gli errori) che i valori degli esponenti critici sono gli stessi di quelli calcolati per il modello di Ising tridimensionale (1.14). Questo perchè, sebbene fisicamente completamente differenti, ferromagneti uniassiali e sistemi gas-liquido sono simili per quanto riguarda la natura della loro interazione che è sempre di tipo a corto range. Diremo quindi che fenomeni che mostrano lo stesso comportamento universale in un intorno del punto critico (hanno cioè gli stessi esponenti critici, rapporti di ampiezze, ...) appartengono alla stessa classe di universalità. Uno degli obiettivi principali dello studio dei fenomeni critici è appunto quello di classificare le varie classi di universalità, e di studiarne tutte le caratteristiche universali.

A questo punto appare chiara l'importanza dell'universalità dei fenomeni critici. Infatti per calcolare quantità non universali si adottano di solito modelli semi-realistici e si procede con successive correzioni. Comunque, anche se il modello matematico è risolto esattamente, le predizioni che esso dà sono solo approssimazioni. Per calcolare quantità universali, invece, si può scegliere un qualsiasi modello matematico (più semplice è, più facile risulta il computo delle grandezze cercate) appartenente alla stessa classe di universalità del sistema in esame. In questo caso l'unica fonte d'errore sono le approssimazioni necessarie per risolvere il modello scelto (difficilmente si riesce a risolverlo esattamente) e le quantità calcolate risultano quindi molto più precise di quelle non universali.

Se consideriamo un sistema ferromagnetico ad una temperatura T poco al di sopra di T_c , questo avrà magnetizzazione media zero. Comunque, se studiamo la distribuzione locale $M(\mathbf{r})$ (ad esempio con un esperimento di scattering neutronico) troveremo che ci sono regioni dove $M(\mathbf{r})$ non si media a zero. La dimensione caratteristica di queste regioni è chiamata lunghezza di correlazione ξ . per $T \rightarrow T_c$ essa obbedisce ad una legge a potenza del tipo

$$\xi(T) \simeq a(T - T_c)^{-\nu} \quad (1.16)$$

dove a è dell'ordine della dimensione della cella elementare e ν è un altro esponente critico. La caratteristica essenziale è che $\xi \gg a$ quando T è sufficientemente vicino a T_c . Dato che le regioni correlate sono molto più grandi della distanza fra gli atomi, la maggior parte dei dettagli della struttura reticolare (accoppiamenti fra i diversi atomi e così via) diventa irrilevante. Ciò spiega intuitivamente perchè il comportamento in vicinanza del punto critico diventa universale.

Da questa osservazione sperimentale scaturisce l'*ipotesi di scala* secondo la quale ξ dà l'unica scala di lunghezza rilevante per il comportamento di questi sistemi. Grazie a questa ipotesi si può predire una forma del tutto generale per la funzione a due punti $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (= \langle S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} \rangle$ nel modello di Ising). Considerazioni di invarianza di scala permettono di ricavare al punto critico (dove $\xi(T_c) = \infty$)

$$G(\mathbf{r}_1) = G(\mathbf{r}_2) \left(\frac{|\mathbf{r}_1|}{|\mathbf{r}_2|} \right)^{d-2+\eta}, \quad \text{per } T = T_c \quad (1.17)$$

che definisce l'esponente critico η . Per $T > T_c$, molto vicini al punto critico in modo che sia ancora $\xi \gg a$, esistono fondamentalmente due regimi di comportamento per $G(\mathbf{r})$: per $a \ll r \ll \xi$ vale ancora il comportamento dettato dalla (1.17) mentre per $a \ll \xi \ll r$ la funzione di correlazione decresce esponenzialmente (l'invarianza di scala non vale più a causa della presenza di ξ come scala rilevante per il sistema). Si vede quindi che la temperatura è un parametro estremamente rilevante per il comportamento a grandi distanze: Il sistema diventa sempre più sensibile ad una deviazione di T da T_c man mano che la distanza su cui si osserva il sistema cresce. Queste considerazioni portano all'espressione

$$G(\mathbf{r}, T) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} g\left(\frac{r}{\xi(T)}\right) \quad (1.18)$$

dove G è regolare nell'origine e decresce esponenzialmente per $r \rightarrow \infty$

Consideriamo adesso l'energia libera per unità di volume. Ci si aspetta che le fluttuazioni contribuiscano alla sua parte singolare proporzionalmente al rapporto fra l'unità di volume ed un volume di dimensione lineare dell'ordine di $\xi(T)$ ovvero sia

$$F_{sing}(T) \sim \frac{1}{\xi(T)^d} \sim (T - T_c)^{d\nu}. \quad (1.19)$$

Questa è chiamata *ipotesi di "hyperscaling"*. Come conseguenza, l'esponente α della parte singolare del calore specifico $C_{h,sing}$ (vedi (1.5-1.12)) è dato da

$$\alpha = 2 - \nu d \quad (1.20)$$

La suscettività (1.7) è proporzionale all'integrale della funzione a due punti. Usando (1.18) si deduce che

$$\chi(T) \sim \int_{a < |\mathbf{r}| < \xi(T)} d^d \mathbf{r} \frac{1}{|\mathbf{r}|^{d-2+\eta}} \sim \xi(T)^{2-\eta} \quad (1.21)$$

da cui si ottiene (vedi 1.10) la legge di scala

$$\gamma = \nu(2 - \eta). \quad (1.22)$$

Altre leggi di scala che possono essere dimostrate usando l'ipotesi di scala e di "hyperscaling" sono

$$\begin{aligned} \beta(\delta - 1) &= \gamma, \\ \gamma + 2\beta + \alpha &= 2. \end{aligned} \quad (1.23)$$

1.2 Polimeri: proprietà fisiche

Un polimero è una molecola che consiste di molti “monomeri” (gruppi di atomi) uniti da legami chimici. La *funzionalità* di un monomero è il numero di legami chimici che esso ha a disposizione, cioè il numero di altri monomeri con cui può legarsi. Se ogni monomero ha funzionalità due, allora si formerà un polimero *lineare* (ad esempio il Polyethylene, dove ogni monomero è un CH_2). La catena terminerà legandosi ad ogni estremità con un monomero di funzionalità uno (ad esempio il CH_3), oppure richiudendosi su se stessa a formare un polimero ad *anello*. Se invece un polimero include monomeri con funzionalità più alta, allora si formerà un polimero *branched* con struttura ad albero.

I polimeri possono essere molto grandi, costituiti da più di 10^5 monomeri. Quindi la scala di lunghezza dell'intero polimero è macroscopica rispetto alla scala di lunghezza del singolo monomero. Tipicamente la lunghezza di ogni legame è essenzialmente costante lungo la catena così come l'angolo tra ogni coppia di monomeri successivi. Comunque c'è una certa libertà rotazionale per l' i -esimo legame intorno all'asse determinato dall'($i-1$)-esimo. In alcuni casi, una ragionevole approssimazione può essere quella di permettere a quest'angolo di rotazione di assumere solo tre differenti valori (ad esempio 0° e $\pm 120^\circ$) magari con differenti probabilità (un angolo di 0° significa che l' i -esimo, l'($i-1$)-esimo e l'($i-2$)-esimo legame giacciono nello stesso piano). Questi angoli corrispondono alle configurazioni locali di energia minima, e dipendono dai particolari monomeri presenti. Riassumendo, un polimero può essere sostanzialmente considerato come una catena flessibile, con una rigidità locale, su scala molto più piccola della sua dimensione macroscopica, dovuta ai vincoli imposti dai legami fra monomeri successivi.

Se R è l'estensione lineare media di una catena (ad esempio R è il raggio di girazione R_g che corrisponde alla distanza quadratica media dei monomeri dal baricentro della catena), si osserva sperimentalmente che questa grandezza ha un andamento, per numero di monomeri N che tende all'infinito, del tipo $R \sim AN^\nu$. Questo comportamento, come molte altre proprietà dei polimeri nel limite $N \rightarrow \infty$, è caratteristico di un fenomeno critico in cui il ruolo della variabile termica è giocato da $1/N$. Di conseguenza ci si aspetta che l'esponente ν sia universale, che valga cioè per tutti i polimeri lineari; inoltre, dato che per i polimeri esiste una sola scala di lunghezza macroscopica rilevante, ci si aspetta che se ν_g è l'esponente per il raggio di girazione, esso sia uguale agli esponenti per le altre grandezze che descrivono l'estensione lineare di una catena (distanza fra gli estremi della catena o raggio quadratico medio). L'ampiezza A è invece non universale: essa dipende dai dettagli microscopici dei monomeri e delle molecole di solvente.

Teoricamente e sperimentalmente, supponendo nota la distribuzione della lunghezza delle molecole di polimero in soluzione, ci sono due quantità che ne caratterizzano il comportamento: la temperatura, che controlla la solubilità, e la concentrazione. Daremo ora una breve descrizione della dipendenza del comportamento delle soluzioni di polimeri da questi due parametri.

Iniziamo con la dipendenza dalla temperatura. Un fatto sperimentalmente importante è che il mescolamento di un soluto polimerico in un solvente è un processo endotermico. Ciò mostra la presenza di forze attrattive tra le molecole del soluto, indipendentemente dagli effetti di volume escluso (dovuti alla repulsione sterica fra monomeri quando questi sono troppo vicini). Queste forze, di tipo Van der Waals, esprimono il fatto che contatti soluto-soluto o solvente-solvente sono preferiti rispetto a quelli soluto-solvente,

così che l'energia di mescolamento (differenza fra energia della soluzione ed energia del soluto e del solvente prima del mescolamento) risulta positiva. Questa energia diventa molto piccola o addirittura si annulla quando le molecole del solvente hanno la stessa polarizzabilità dei monomeri. Questo caso è chiamato “atermico” perchè solo il termine entropico sopravvive nell'energia libera della soluzione e quindi la temperatura non ha più influenza sul comportamento del sistema. Le forze di Van der Waals sono bilanciate da effetti entropici, dalla tendenza cioè del sistema ad espandersi nello spazio delle fasi. Esse inoltre diminuiscono all'aumentare della temperatura. Per le soluzioni diluite abbiamo quindi due regimi possibili, caratterizzati da un differente comportamento critico di R

1. regione di alta temperatura che corrisponde al regime chiamato di “buon”-solvente. In questa regione i polimeri sono “gonfi” rispetto alle catene Browniane (in $d = 3$ $\nu > 1/2$ dove $1/2$ è il valore Browniano).
2. regione di bassa temperatura che corrisponde al regime di solvente “povero”. In questa regione i polimeri sono compatti e la loro tipica estensione è più piccola di quella delle catene Browniane (in $d = 3$ $\nu < 1/2$).

La temperatura di transizione si chiama temperatura θ di Flory. Essa corrisponde alla temperatura alla quale le forze di Van der Waals bilanciano la repulsione sterica. A questa temperatura, in $d = 3$, i polimeri si comportano come catene Browniane.

Restringendoci al caso di buon-solvente, consideriamo il comportamento dei polimeri in funzione della concentrazione. Il regime di alte concentrazioni, che corrisponde a polimeri allo stato fuso, può essere studiato con successo in approssimazione di campo medio. Infatti in questo caso, dato che ogni monomero interagisce allo stesso tempo con un grande numero di altre particelle dello stesso tipo, si possono ragionevolmente trascurare le fluttuazioni e una descrizione di campo-medio in cui ogni monomero sente solo un valore medio del campo determinato da tutte le altre particelle appare essenzialmente corretta. Un interessante risultato dovuto a Flory dice che, allo stato fuso, le catene sono essenzialmente ideali, come se i monomeri non fossero soggetti ad alcuna forza. Per capire il risultato di Flory si deve focalizzare l'attenzione su un monomero di una singola catena. Esso sente un potenziale repulsivo U degli altri monomeri della catena, proporzionale alla concentrazione, con un massimo nel mezzo della catena e che tende a spingere i monomeri verso l'esterno (effetto di gonfiaggio). D'altra parte questo effetto è compensato da un simile comportamento dei monomeri delle altre catene. Dato che la concentrazione è uniforme, non c'è alcuna forza netta agente sui monomeri.

Sul fronte opposto abbiamo il regime diluito. Per ottenere il comportamento approssimato di un polimero isolato in soluzione, si può adoperare un argomento di campo medio dovuto anch'esso a Flory [2, 3, 4]. Sebbene il ragionamento sia estremamente semplificato, il risultato finale dà un' approssimazione molto buona del valore dell' esponente ν . Si consideri un polimero lineare con N monomeri rappresentato da un cammino aleatorio di $N-1$ passi $\omega = (\omega(0), \dots, \omega(N))$ in \mathbf{Z}^d . Sia R il raggio di girazione di ω , con ω consistente in N monomeri distribuiti in un volume dell' ordine di R^d . Assumendo l'uniformità, la densità è di $\rho = N/R^d$ monomeri per unità di volume. L'energia repulsiva dovuta agli effetti di volume escluso dipende dal numero di coppie di monomeri per unità di volume, e noi la considereremo uguale a ρ^2 . Qui sta l' approssimazione di campo medio: si usa

l'assunzione di uniformità in modo molto forte, ignorando le grandi correlazioni nella posizione consecutiva di monomeri di una stessa catena. Quindi l'energia repulsiva totale risulta

$$E_{rep} \sim R^d \rho^2 = \frac{N^2}{R^d}, \quad (1.24)$$

che è funzione decrescente dell'estensione della catena. Ora consideriamo l'energia libera di una catena di estensione R , in assenza di repulsione. L'energia interna non dipende da R e quindi non interessa il nostro ragionamento. F è data allora dall'entropia cambiata di segno, dove quest'ultima è il logaritmo del numero di configurazioni (e quindi cammini) di raggio R . Senza interazione, essa può essere trovata dal comportamento gaussiano di una catena ideale (Browniana). Prendendo R come la distanza estremo-estremo, proporzionale per quanto detto in precedenza al raggio di girazione, e fissando $\omega(0) = 0$, si ha

$$P\{\omega(N) = x\} \approx N^{-d/2} \exp(-\frac{|x|^2}{N}) \quad (1.25)$$

per ogni $x \in \mathbf{Z}^d$ (vedi sezione 1.4), e quindi

$$P\{|\omega(N)| = R\} \approx \frac{R^{d-1}}{N^{d/2}} \exp(-\frac{R^2}{N}). \quad (1.26)$$

Il numero totale di cammini di N passi è $(2d)^d$, nel caso in cui ogni sito sia primo vicino del precedente e del successivo, così che l'energia libera è

$$\begin{aligned} F &= -\log[(2d)^N P\{|\omega(N)| = R\}] \\ &= -(d-1) \log R + \frac{R^2}{N} + \text{cost.} \end{aligned} \quad (1.27)$$

Essa può essere vista anche come un termine di energia “elastica” che impedisce a R di diventare troppo grande. L'energia totale del polimero è quindi la somma di (1.24) e (1.27). Se ora si pone $R \propto N^\nu$ l'energia totale diventa

$$E_{rep} + F \sim N^{2-d\nu} + N^{2\nu-1} - \nu(d-1) \log N + \text{cost} \quad (1.28)$$

Minimizzando la precedente rispetto a ν , nel limite di grandi N , si ottiene $2-d\nu = 2\nu-1$ che dà immediatamente

$$\nu_{\text{Flory}} = \frac{3}{d+2} \quad (1.29)$$

Sostituendo questo valore in (1.28), i primi due termini diventano $N^{(4-d)/(d+2)}$, e questi sono dominanti se e solo se $d < 4$. Se $d = 4$, bisogna modificare leggermente l'argomento: il valore predetto è $\nu = 3/(4+2) = 1/2$ dato che questo è l'unico valore per il quale i primi due termini della (1.28) rimangono limitati. Per $d > 4$, ogni valore di ν nell'intervallo $[2/d, 1/2]$ mantiene i primi due termini della (1.28) limitati. Sembra plausibile dover prendere il più grande valore in questo intervallo così da minimizzare il termine $-\nu(d-1) \log N$ nella (1.28), ottenendo infine $\nu = 1/2$ per $d > 4$ (dato che $\nu = 1/2$ nel caso ideale, l'aggiunta di un'energia repulsiva non può abbassare ν al di sotto di $1/2$). Si hanno così i seguenti valori

$$\nu_{\text{Flory}} = \begin{cases} 1 & \text{se } d = 1 \\ 3/4 & \text{se } d = 2 \\ 3/5 & \text{se } d = 3 \\ 1/2 & \text{se } d \geq 4 \end{cases} \quad (1.30)$$

Essi sono corretti per $d = 1, 2$ e per $d \geq 4$. Il valore per $d = 3$ è leggermente troppo grande; simulazioni numeriche e calcoli di teoria dei campi danno un valore vicino a 0.588. Il successo dell'argomento di Flory è dovuto alla compensazione di due errori: entrambe E_{rep} e F sono largamente sovrastimate.

1.3 Polimeri e teoria dei campi

La più importante scoperta teorica nello studio dei polimeri è dovuta a de Gennes [5], che evidenziò come il comportamento critico di soluzioni diluite di polimeri possa essere ottenuto studiando il modello *sigma* nonlineare nel limite $n \rightarrow 0$. Questo risultato è di fondamentale importanza perchè permette l'applicazione, alla fisica dei polimeri, di molti strumenti sviluppati in teoria dei campi. In questa sezione metteremo in luce tale legame, utilizzando modelli definiti su reticolo e passando, in alcuni casi particolari, al limite continuo. In questo modo potremo dare significato alle espressioni formali in cui è presente l'integrazione funzionale, largamente utilizzate in fisica dei polimeri (ad esempio nel modello standard come si vedrà nella sezione successiva).

1.3.1 Random Walk e modello gaussiano

Un modello per i polimeri è rappresentato dal *random walk* (RW). Un RW è definito come un cammino aleatorio $\{\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_N\}$ in \mathbf{Z}^d dove $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{i+1})$ sono siti primi vicini (il numero di coordinazione q del reticolo è in questo caso $2d$). Esso può essere visto come un cammino descritto da un punto che si muove con probabilità $1/q$ da un sito ad un'altro primo vicino. Vogliamo calcolare la probabilità $P(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_0, t_0)$ che il punto sia nel sito \mathbf{r}_1 al tempo t_1 , sapendo che esso era nel sito \mathbf{r}_0 al tempo t_0 (abbiamo associato al processo un tempo discreto). Si ottiene la seguente relazione di ricorrenza tra le probabilità a tempi successivi t e $t + 1$ che segue dal fatto che il punto può raggiungere, in un passo, solo un primo vicino.

$$P(\mathbf{r}, t + 1; \mathbf{r}_0, t_0) = \frac{1}{2d} \sum_{\mathbf{r}'} P(\mathbf{r}', t; \mathbf{r}_0, t_0) \quad (1.31)$$

dove gli \mathbf{r}' sono primi vicini di \mathbf{r} . Essa può essere riscritta, usando la versione discretizzata del Laplaciano Δ_r , come

$$P(\mathbf{r}, t + 1; \mathbf{r}_0, t_0) - P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \Delta_r P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) \quad (1.32)$$

che è una versione discretizzata dell'equazione di diffusione

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \Delta \right) P = 0 \quad (1.33)$$

Lavorando in trasformata di Fourier e riscalandolo distanze e tempi in modo da avere un intervallo reticolare a ed un intervallo di tempo τ , si ottiene

$$\frac{P(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0, t_1 - t_0)}{a^d} = \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)} \left(\frac{1}{d} \sum_{\mu} \cos a k_{\mu} \right)^{(t_1 - t_0)/\tau} \quad (1.34)$$

A questo punto possiamo mandare a e τ a zero mantenendo distanze e intervalli di tempo fissati. Al primo membro si ottiene così una densità di probabilità $p(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0, t_1 - t_0)$ non banale solo nel caso in cui si mantiene fisso il rapporto τ/a^2 , come si vede da

$$\left(\frac{1}{d} \sum_{\mu} \cos a k_{\mu} \right)^{(t_1-t_0)/\tau} = \left(1 - \frac{a^2}{2d} \mathbf{k}^2 + \dots \right)^{(t_1-t_0)/\tau} \rightarrow e^{-(t_1-t_0)\mathbf{k}^2} \quad (1.35)$$

in cui la scala dei tempi è stata fissata usando $\tau = \frac{1}{2d}a^2$. Si ottiene così

$$\begin{aligned} p(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0, t_1 - t_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0) - (t_1 - t_0)\mathbf{k}^2} \\ &= \frac{1}{[4\pi(t_1 - t_0)]^{d/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)^2}{4(t_1 - t_0)} \right) \end{aligned} \quad (1.36)$$

Possiamo adesso calcolare la distanza media fra gli estremi di un RW che parte dall'origine e si muove per un tempo fissato t . Si ottiene

$$\langle \mathbf{r}^2 \rangle = \int d^d \mathbf{r} \, \mathbf{r}^2 p(\mathbf{r}, t) = 2dt \quad (1.37)$$

Notiamo che, facendo il limite in modo da mantenere costante il rapporto τ/a^2 , non ha più senso parlare di lunghezza della catena $(t_1 - t_0)a/\tau$. Tenendo $(t_1 - t_0)$ costante, questa è diventata infinita mentre la quantità $(t_1 - t_0)a^2/\tau = 2d(t_1 - t_0)$ è rimasta finita e corrisponde proprio a $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$. Si può mostrare, per un generico cammino aleatorio, che $\langle \mathbf{r}^2 \rangle^{1/2} \sim t^\nu = t^{1/d_H}$ dove d_H è la dimensione di Hausdorff della curva descritta dal cammino. Per una catena Browniana, tale dimensione è appunto due.

Nel caso dei polimeri il tempo t corrisponde al numero di monomeri N della catena mentre $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ è la *distanza quadratica media fra gli estremi* $\langle R_e^2 \rangle$ per la quale si osserva un andamento del tipo AN^ν per $N \rightarrow \infty$. Usando come modello il RW si ottiene quindi $\nu = 1/2$.

Definiamo ora la funzione generatrice

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0; \lambda) = \lambda \sum_{t_1=t_0}^{\infty} \lambda^{t_1-t_0} P(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0, t_1 - t_0) = \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)}}{\lambda^{-1} - \frac{1}{d} \sum_{\mu} \cos k_{\mu}} \quad (1.38)$$

(dove si è usata la (1.34)) che soddisfa la

$$[-\Delta_r + (\lambda^{-1} - 1)]G(\mathbf{r}; \lambda) = -\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{0}} \quad (1.39)$$

da cui il nome di funzione di Green per l'operatore Δ_r . Per $\lambda = 1$, essa rappresenta il tempo medio trascorso in un dato sito.

Questa funzione è l'analogo del propagatore massivo in una teoria di campo euclidea libera. Introducendo nuovamente l'intervallo reticolare a e mandando $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}/a$, $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}a$, il limite continuo si ottiene per $1/\lambda \equiv 1 + m^2 a^2/2d$, con $a \rightarrow 0$

$$g(\mathbf{r}, m^2) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{2da^{d-2}} G\left(\frac{\mathbf{r}}{a}; \lambda\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\mathbf{k}^2 + m^2} \quad (1.40)$$

La probabilità $P(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0, t_1 - t_0)$ può essere interpretata come il rapporto fra il numero di cammini che congiungono \mathbf{r}_1 con \mathbf{r}_0 in $t_1 - t_0$ passi ed il numero totale di cammini

di $t_1 - t_0$ passi originati da \mathbf{r}_0 . Quest'ultimo è uguale a $q^{t_1-t_0} = (2d)^{t_1-t_0}$. Consideriamo un cammino ω come l'insieme di "link" che unisce \mathbf{r}_0 a \mathbf{r}_1 e indichiamo con $\partial\omega$ la sua frontiera, ovverosia $\{\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1\}$. Possiamo allora riscrivere la precedente affermazione nella forma

$$P(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0, t_1 - t_0) = \sum_{\substack{\omega, \partial\omega = \{\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1\} \\ |\omega| = t_1 - t_0}} \left(\frac{1}{2d}\right)^{|\omega|} \quad (1.41)$$

dove $|\omega|$ è il numero di links di ω . Questa espressione è facilmente generalizzata alla funzione di Green, e, da (1.38) con $\lambda < 1$,

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0; \lambda) = \lambda \sum_{\omega, \partial\omega = \{\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1\}} \left(\frac{\lambda}{2d}\right)^{|\omega|}. \quad (1.42)$$

Da questa sembrerebbe che l'analogia nel continuo sia una somma su cammini con pesi del tipo $\exp(-A|\omega|)$. In ogni caso, la corretta procedura per raggiungere il limite continuo, dà un risultato nettamente diverso da quello aspettato intuitivamente. Dalla (1.40) si ha

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, m^2) &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{2da^{d-2}} \sum_{t/\tau=0}^{\infty} \left(1 + \frac{m^2 a^2}{2d}\right)^{-t/\tau} P\left(\frac{\mathbf{r}}{a}, \frac{t}{\tau}\right) \\ &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{a^2}{2d} \sum_{t/\tau=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{m^2 a^2 t}{2d\tau}\right) p(\mathbf{r}, t) \\ &= \int_0^{\infty} dt e^{-m^2 t} p(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.43)$$

Usando la proprietà di convoluzione di p

$$p(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_0, t_0) = \int d^d \mathbf{r} p(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}, t) p(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) \text{ per } t_0 < t < t_1 \quad (1.44)$$

e dividendo $t_1 - t_0$ in un numero arbitrario di intervalli si arriva a

$$\begin{aligned} p(\mathbf{r}_f, t_f; \mathbf{r}_i, t_i) &= \int \prod_{j=1}^{n-1} \frac{d^d \mathbf{r}_j}{[4\pi(t_{j+1} - t_j)]^{d/2}} \frac{1}{[4\pi(t_1 - t_i)]^{d/2}} \\ &\quad \cdot \exp\left[-\frac{1}{4} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(\mathbf{r}_{j+1} - \mathbf{r}_j)^2}{t_{j+1} - t_j}\right] \end{aligned} \quad (1.45)$$

(con $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_n = \mathbf{r}_f$). Questa espressione dà un significato preciso alla formula simbolica

$$p(\mathbf{r}_f, t_f; \mathbf{r}_i, t_i) = \int_{\substack{\mathbf{r}(t_i) = \mathbf{r}_i \\ \mathbf{r}(t_f) = \mathbf{r}_f}} \mathcal{D}\mathbf{r}(t) \exp\left[-\frac{1}{4} \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)^2\right] \quad (1.46)$$

dove $\mathcal{D}\mathbf{r}(t)$ indica un'integrazione sulle posizioni a tempi intermedi, normalizzata come indicato in (1.45). Eq. (1.43) porta ad una simile espressione per $g(\mathbf{r}, m^2)$

$$g(\mathbf{r}, m^2) = \int_0^{\infty} dt \int_{\substack{\mathbf{r}(0) = \mathbf{0} \\ \mathbf{r}(t) = \mathbf{r}}} \mathcal{D}\mathbf{r}(t') \exp\left[-\int_0^t dt' \left(m^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)^2\right)\right] \quad (1.47)$$

Questi integrali di cammino nel continuo, il cui significato rigoroso è indicato dalla formula (1.45), sono molto differenti dalla controparte discreta. L'azione è ora $\int_0^t dt' (m^2 +$

$\frac{1}{4}\dot{\mathbf{r}}(t')^2$), con una scala di distanza definita dall'inverso di m . Questa forma deriva dal comportamento a piccole distanze del limite continuo $p(\mathbf{r}, t) \sim \exp(-\mathbf{r}^2/4t)$, e non dal partner discreto P . Infatti nel continuo la lunghezza del cammino sarebbe $\int_0^t dt' \sqrt{\dot{\mathbf{r}}^2}$. Infine, l'espressione discreta è indipendente dalla parametrizzazione del cammino mentre quella nel continuo non lo è più.

Consideriamo ora una classe di modelli con campi euclidei interagenti, invariante sotto il gruppo ortogonale $O(n)$. Il campo vettoriale ad n componenti φ è definito su ogni sito di \mathbf{Z}^d e ciascuna sua componente può assumere valori nel range $]-\infty, +\infty[$. Consideriamo un'azione del tipo

$$S(\varphi) = -\beta \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \varphi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}') + \sum_{\mathbf{r}} V(\varphi^2) \quad (1.48)$$

con un termine locale di interazione del tipo

$$V(\varphi^2) = \frac{1}{2}\mu^2\varphi^2 + \frac{1}{4}g(\varphi^2)^2 \quad (1.49)$$

dove $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sono tutte le coppie di primi vicini del reticolo ($V(\varphi^2) = \frac{1}{2}\mu^2\varphi^2$ corrisponde al caso libero, anche detto *modello gaussiano*). La funzione di partizione e le funzioni di correlazione sono definite come

$$Z = \int \left[\prod_{\substack{\alpha=1 \\ \mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d}}^n \frac{d\varphi^\alpha(\mathbf{r})}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-S(\varphi)} = \int \prod_{\mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d} \left\{ e^{-V(\varphi^2)} \prod_{\alpha=1}^n \frac{d\varphi^\alpha(\mathbf{r})}{\sqrt{2\pi}} \right\} e^{\beta \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \varphi(\mathbf{r}) \cdot \varphi(\mathbf{r}')} \quad (1.50)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi^{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \dots \varphi^{\alpha_{2k}}(\mathbf{r}_{2k}) \rangle &= Z^{-1} \int \prod_{\mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d} \left\{ e^{-V(\varphi^2)} \prod_{\alpha=1}^n \frac{d\varphi^\alpha(\mathbf{r})}{\sqrt{2\pi}} \right\} \\ &\cdot e^{\beta \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \varphi(\mathbf{r}) \cdot \varphi(\mathbf{r}')} \varphi^{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \dots \varphi^{\alpha_{2k}}(\mathbf{r}_{2k}) \end{aligned} \quad (1.51)$$

nelle quali si è già assunto il limite di volume infinito. Solo due dei tre parametri β, μ^2, g sono realmente indipendenti. Perchè l'azione sia limitata (dal basso), ci restringiamo a $g \geq 0$ senza però imporre $\mu^2 \geq 0$; Il punto $g = 0$ è allora singolare in quanto gli integrali non possono essere definiti per valori arbitrariamente piccoli di g . Per $n = 1$ e nel limite $g + \mu^2 = 0, g \rightarrow \infty$, otteniamo il modello di Ising con φ costretto ad assumere i soli valori ± 1 . Quando $n > 1$, questo limite vincola $|\varphi|$ ad essere costante ottenendo così il modello σ non lineare. Per motivi di calcolo conviene introdurre la trasformata di Laplace di $\exp(-V(\varphi^2))$ in modo da poter poi ottenere degli integrali gaussiani sui campi φ

$$e^{-V(\varphi^2)} = \int d\mu(a) e^{-a\varphi^2} \quad (1.52)$$

Essa definisce la misura $d\mu(a)$. Gli integrali adesso contengono implicitamente una prescrizione per il cammino di integrazione su a che corre lungo l'asse immaginario. Usando l'operatore $\sigma f(\mathbf{r}) \equiv 2d(\Delta_r + 1)f(\mathbf{r})$ ed effettuando l'integrazione gaussiana si ottiene

$$Z = \int \prod_{\mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d} \frac{d\mu(a_{\mathbf{r}})}{(2a_{\mathbf{r}})^{n/2}} \det^{-n/2} \left[1 - \frac{\beta\sigma}{2a_{\mathbf{r}}} \right] \quad (1.53)$$

e per la funzione a due punti

$$\begin{aligned} \langle \varphi^{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \varphi^{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \rangle &= Z^{-1} \int \prod_{\mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d} \frac{d\mu(a_{\mathbf{r}})}{(2a_{\mathbf{r}})^{n/2}} \det^{-n/2} \left[1 - \frac{\beta\sigma}{2a_{\mathbf{r}}} \right] \\ &\cdot \delta^{\alpha_1\alpha_2} \langle \mathbf{r}_1 | \frac{1}{2a_{\mathbf{r}} - \beta\sigma} | \mathbf{r}_2 \rangle \end{aligned} \quad (1.54)$$

dove l'ultimo fattore dell'integrando è la funzione di Green per i campi liberi (si veda Eq. (1.39)), generalizzata al caso in cui $a_{\mathbf{r}}$ dipenda da \mathbf{r} . È comunque ancora valida l'espansione in termini di cammini congiungenti \mathbf{r}_1 con \mathbf{r}_2 e generalizzando l'Eq. (1.42) si ha

$$\langle \mathbf{r}_1 | \frac{1}{2a_{\mathbf{r}} - \beta\sigma} | \mathbf{r}_2 \rangle = \sum_{\omega, \partial\omega = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}} \beta^{|\omega|} \prod_{\mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d} \left(\frac{1}{2a_{\mathbf{r}}} \right)^{n_{\mathbf{r}}(\omega)} \quad (1.55)$$

dove la $n_{\mathbf{r}}(\omega) \geq 0$ sta per il numero di volte che il cammino passa attraverso \mathbf{r} , cioè il tempo trascorso nel punto \mathbf{r} . Naturalmente $\sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}}(\omega) = |\omega| + 1$ così che solo un numero finito di $n_{\mathbf{r}}(\omega)$ è diverso da zero.

Nel caso libero ($V(\varphi^2) = \frac{1}{2}\mu^2\varphi^2$) si ottiene, dopo alcuni passaggi che permettono l'integrazione sulle variabili $a_{\mathbf{r}}$ e sui campi φ . Si ottiene così la rappresentazione delle funzioni di correlazione del campo libero in termini di RW

$$\langle \varphi^{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \varphi^{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \rangle = \delta^{\alpha_1 \alpha_2} \langle \mathbf{r}_1 | \frac{1}{\mu^2 - \beta\sigma} | \mathbf{r}_2 \rangle = \delta^{\alpha_1 \alpha_2} \frac{1}{\mu^2} \sum_{\omega, \partial\omega = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}} \left(\frac{\beta}{\mu^2} \right)^{|\omega|} \quad (1.56)$$

1.3.2 Self-avoiding walk e modello σ

Studiamo ora la dipendenza da n delle funzioni di correlazione, con particolare attenzione alla funzione a due punti. Utilizzando l'Eq. (1.54) si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{\alpha} \langle \varphi^{\alpha}(\mathbf{r}_1) \varphi^{\alpha}(\mathbf{r}_2) \rangle &= Z^{-1} \sum_{\omega, \partial\omega = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}} \beta^{|\omega|} \int \prod_{\mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d} \left(d\mu(a_{\mathbf{r}}) (2a_{\mathbf{r}})^{-\frac{n}{2} - n_{\mathbf{r}}(\omega)} \right) \cdot \\ &\quad \cdot \det^{-n/2} \left[1 - \frac{\beta\sigma}{2a_{\mathbf{r}}} \right] \end{aligned} \quad (1.57)$$

La dipendenza da n è scritta esplicitamente dovunque, eccetto che nella misura di integrazione $d\mu(a_{\mathbf{r}})$. Per semplici potenziali $V(\varphi^2)$, è possibile effettuare una continuazione analitica in n e fare il limite $n \rightarrow 0^+$. Si ha così una semplificazione dovuta al fatto che

$$\lim_{n \rightarrow 0} \det^{-n/2} \left(1 - \frac{\beta\sigma}{2a_{\mathbf{r}}} \right) = 1. \quad (1.58)$$

In pochi passaggi si arriva poi alla seguente

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \langle \varphi(\mathbf{r}_1) \cdot \varphi(\mathbf{r}_2) \rangle = \sum_{\omega, \partial\omega = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}} \beta^{|\omega|} \prod_{\mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d} \rho_{n_{\mathbf{r}}(\omega)} \quad (1.59)$$

dove, nel caso di azioni della forma (1.49),

$$\rho_k = \begin{cases} 1 & \text{per } k = 0 \\ \int_0^\infty dt \frac{t^{k-1}}{(k-1)!} e^{-(\mu^2 t + g t^2)} & \text{per } k \geq 1 \end{cases} \quad (1.60)$$

Il peso di ogni cammino è fattorizzato nel prodotto dei pesi di ciascun sito, i quali dipendono dal numero di visite ricevute. Dalla (1.60) si può dimostrare che quando il numero di visite ad un sito aumenta, il corrispondente peso diminuisce (ρ_k decrescente in k).

Consideriamo adesso il limite $n \rightarrow 0$ per il modello σ non lineare, che vincola $\varphi^2 = n$. Questo si ottiene scegliendo $\mu^2 = -ng$ e facendo il limite $g \rightarrow \infty$ (prima di $n \rightarrow 0$). Infatti per una funzione test regolare si ha

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\int \prod_{\alpha} \frac{d\varphi^{\alpha}}{\sqrt{2\pi}} e^{g[n\varphi^2/2 - (\varphi^2)^2/4]} f(\varphi)}{\int \prod_{\alpha} \frac{d\varphi^{\alpha}}{\sqrt{2\pi}} e^{g[n\varphi^2/2 - (\varphi^2)^2/4]}} = \frac{\int \prod_{\alpha} d\varphi^{\alpha} \delta(\varphi^2 - n) f(\varphi)}{\int \prod_{\alpha} d\varphi^{\alpha} \delta(\varphi^2 - n)} \quad (1.61)$$

In questo limite si ha

$$\rho_k = \lim_{n \rightarrow 0} (n/2)^k \frac{\Gamma(n/2)}{\Gamma(n/2 + k)} \quad (1.62)$$

e finalmente

$$\rho_k = \begin{cases} 1 & \text{per } k = 0, 1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (1.63)$$

Questo risultato (de Gennes [5]), mostra che nel limite $n \rightarrow 0$, le funzioni di correlazione del modello σ nonlineare sono rappresentabili con una somma su cammini senza auto-intersezioni (anche detti *self-avoiding walk* (SAW)) che, grazie a questo effetto di volume escluso, sono un ottimo modello per i polimeri in un “buon” solvente. Guardando al limite continuo di questi modelli, le proprietà di intersezione dei cammini Browniani suggeriscono che, in dimensione più grande di quattro, le interazioni del tipo φ^4 non avranno effetto sul limite critico e la teoria sarà quindi libera (cioè un modello gaussiano). Per $d = 4$, come caso limite, o $d < 4$, il limite continuo sarà invece non banale. Appare così evidente che RW e SAW appartengono a due classi di universalità diverse, e sono quindi adatti a descrivere le proprietà di soluzioni o misture di polimeri in situazioni diverse. Per il SAW l’esponente ν definito in precedenza risulta essere vicino a 0.588 in $d = 3$ ed esattamente $3/4$ in $d = 2$ e quindi, come già visto in precedenza, le catene di polimeri in un “buon” solvente risultano “gonfiate” rispetto alle catene ideali Browniane.

1.4 Proprietà generali dei cammini aleatori

Consideriamo come modello di polimero un generico cammino aleatorio in \mathbf{Z}^d definito da $\omega = (\omega(0), \dots, \omega(N))$, con (ω_{i-1}, ω_i) , $i = 1, \dots, N$ siti primi vicini del reticolo. Denotiamo con $|\omega| = N$ il numero di passi di ω . Sia \mathcal{S}_N (risp. $\mathcal{S}_N(x)$) l’insieme di tutti i cammini di N passi che partono dall’origine e finiscono in un sito qualsiasi (risp. che finiscono in x). Sia poi c_N (risp. $c_N(x)$) il numero di questi cammini. Si osserva per essi il seguente andamento asintotico

$$c_N \sim \mu^N N^{\gamma-1} \quad (1.64)$$

$$c_N(x) \sim \mu^N N^{\alpha_{sing}-2} \quad (x \text{ fissato } \neq 0) \quad (1.65)$$

quando $N \rightarrow \infty$; μ è chiamata la costante connettiva del reticolo, e rappresenta il numero di coordinazione effettivo del reticolo per il modello considerato, mentre γ e α_{sing} sono esponenti critici. Questi ultimi, contrariamente a μ , sono grandezze universali che non dipendono dal tipo specifico di reticolo ma solo dalla sua dimensione. Per il RW $c_N = (2d)^N$ indicando che $\mu = q = 2d$ e che $\gamma = 1$. Per il SAW invece $d^N \leq c_N \leq 2d(2d-1)^{N-1}$ dove la limitazione inferiore si ha contando il numero di cammini nei quali ogni passo è fatto in una delle d possibili direzioni; tali cammini sono necessariamente self-avoiding.

La limitazione superiore si ottiene contando il numero di possibili “non-reversal” RW (NRRW), ovverosia RW che non hanno immediate inversioni (un SAW è necessariamente un NRRW ma non è vero il viceversa). Nel NRRW il primo passo ha $2d$ possibilità mentre i successivi solo $2d - 1$. La costante connettiva è definita come $\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} c_N^{1/N}$ (limite di cui si può dimostrare l’esistenza). A questo punto si ha subito che $d \leq \mu \leq 2d - 1$

Definiamo ora varie grandezze che misurano l’estensione di un cammino aleatorio di N passi.

* La *distanza estremo-estremo*

$$R_e^2 \equiv (\omega_N - \omega_0)^2 \quad (1.66)$$

* Il *raggio di girazione*

$$R_g^2 \equiv \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left(\omega_i - \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N \omega_k \right)^2 = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^N (\omega_i - \omega_j)^2 \quad (1.67)$$

* Il *raggio quadratico medio*

$$R_m^2 \equiv \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N (\omega_i - \omega_0)^2 \quad (1.68)$$

Consideriamo adesso il loro valore medio $\langle R_e^2 \rangle_N$, $\langle R_g^2 \rangle_N$ e $\langle R_m^2 \rangle_N$ rispetto alla distribuzione di probabilità che dà pesi uguali a ad ogni cammino di N passi. Sul loro comportamento, si hanno pochissimi risultati rigorosi, ma in ogni caso ci si aspetta (dalle simulazioni numeriche e dal gruppo di rinormalizzazione) che questo sia del tipo

$$\langle R_e^2 \rangle_N, \langle R_g^2 \rangle_N, \langle R_m^2 \rangle_N \sim N^{2\nu}, \text{ per } N \rightarrow \infty \quad (1.69)$$

dove ν è l’esponente critico (anch’esso universale) già introdotto in precedenza. Il fatto che ν sia lo stesso per tutte e tre le osservabili è, come già detto precedentemente, una conseguenza del fatto che esiste una sola scala di lunghezza intrinseca per questo sistema.

Anche i rapporti fra le ampiezze

$$A_N = \frac{\langle R_g^2 \rangle_N}{\langle R_e^2 \rangle_N}, \quad B_N = \frac{\langle R_m^2 \rangle_N}{\langle R_e^2 \rangle_N} \quad \text{e, ovviamente,} \quad C_N = \frac{\langle R_g^2 \rangle_N}{\langle R_m^2 \rangle_N} \quad (1.70)$$

sono supposti avere valori universali nel limite $N \rightarrow \infty$

Per il SAW, in $d = 2$, esiste una relazione esatta che lega il valore limite A_∞ e B_∞ dei rapporti universali A_N , B_N , per $N \rightarrow \infty$, agli esponenti critici ν e γ ¹, ottenuta, con metodi di invarianza conforme, da Cardy e Saleur [6] e corretta da Caracciolo, Pelissetto e Sokal [7]

$$\lambda A_\infty - 2B_\infty + \frac{1}{2} = 0, \quad \text{dove } \lambda = 2 + \frac{2}{\gamma + 2\nu}, \quad (1.71)$$

Tale relazione, come si vedrà nel capitolo 4, viene soddisfatta con buon’ approssimazione, già per cammini di qualche centinaio di passi. Inoltre, come spiegato nel capitolo 6, una sua generalizzazione fornisce un metodo per determinare il punto critico θ .

¹Più precisamente essa lega A_∞, B_∞ agli autovalori y_t e y_h termico e magnetico del gruppo di rinormalizzazione, per il modello $O(n = 0)$, che si possono esprimere in termini di ν e γ grazie alle relazioni $\nu = 1/y_t$ e $\gamma/\nu = 2y_h - 2$

In accordo con la teoria del gruppo di rinormalizzazione [8, 9], il valore medio di ogni osservabile osservabile globale \mathcal{O} si comporta, nel limite $N \rightarrow \infty$, come

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_N = AN^p & \left[1 + \frac{a_1}{N} + \frac{a_2}{N^2} + \dots + \frac{b_0}{N^{\Delta_1}} + \frac{b_1}{N^{\Delta_1+1}} + \frac{b_2}{N^{\Delta_1+2}} + \dots \right. \\ & \left. + \frac{c_0}{N^{\Delta_2}} + \frac{c_1}{N^{\Delta_2+1}} + \frac{c_2}{N^{\Delta_2+2}} + \dots \right], \end{aligned} \quad (1.72)$$

dove p è l'esponente "leading" e, oltre alle correzioni analitiche della forma a_k/N^k , sono presenti termini non-analitici del tipo b_k^i/N^{Δ_i+k} . Gli esponenti p e Δ_i sono universali mentre le ampiezze non lo sono; inoltre p dipende dall'osservabile in questione, mentre i vari Δ_i no.

Introduciamo il concetto di funzione generatrice che, nel caso del RW o del SAW, ha una interpretazione diretta nella teoria di campo corrispondente. La funzione generatrice della sequenza $\{c_N(x)\}$, detta *funzione a due punti*, è definita come

$$G(x; \beta) = \sum_{N=0}^{\infty} c_N(x) \beta^N = \sum_{\omega: 0 \rightarrow x} \beta^{|\omega|} \quad (1.73)$$

che, come si è visto nella sezione precedente, corrisponde alla funzione di correlazione a due punti in teoria dei campi. Definiamo poi la funzione generatrice della sequenza $\{c_N\}$, corrispondente alla suscettività, (da qui la notazione)

$$\chi(\beta) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} G(x; \beta) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{N=0}^{\infty} c_N(x) \beta^N = \sum_{N=0}^{\infty} c_N \beta^N \quad (1.74)$$

La serie di potenze che definisce la suscettività ha raggio di convergenza $\beta_c = \left[\lim_{N \rightarrow \infty} c_N^{1/N} \right]^{-1} = \frac{1}{\mu}$. Dato che $c_N(x) \leq c_N$, la funzione a due punti ha raggio di convergenza maggiore od uguale a β_c (a cui ci riferiremo come punto critico). Accettando per c_N il comportamento assunto nella (1.64), si può derivare l'andamento di $\chi(\beta)$ per $\beta \rightarrow \beta_c^-$

$$\begin{aligned} \chi(\beta) & \simeq \sum_{N=0}^{\infty} N^{\gamma-1} (\beta \mu)^N = \sum_{N=0}^{\infty} N^{\gamma-1} e^{N \log(1 + \frac{(\beta - \beta_c)}{\beta_c})} \\ & \simeq \int_1^{\infty} x^{\gamma-1} e^{-tx} dx = t^{-\gamma} \int_t^{\infty} y^{\gamma-1} e^{-y} dy \simeq t^{-\gamma} \end{aligned} \quad (1.75)$$

dove $t = -\log(1 + \frac{(\beta - \beta_c)}{\beta_c}) \simeq \frac{\beta_c - \beta}{\beta_c}$ per $\beta \rightarrow \beta_c^-$. Si ottiene così

$$\chi(\beta) \sim (\beta_c - \beta)^{-\gamma}, \quad \text{per } \beta \rightarrow \beta_c^- \quad (1.76)$$

ed è quindi giustificato l'uso del nome γ per l'esponente critico di χ .

Definiamo la *lunghezza di correlazione* $\xi(\beta)$ come

$$\frac{1}{\xi(\beta)} = \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{-\log G((n, 0, \dots, 0); \beta)}{n} \quad (1.77)$$

dove si è fatto il limite per estremi del cammino che giacciono su uno degli assi coordinati. Si dimostra banalmente che $1/\xi(\beta)$ non è infinito considerando il cammino che parte

dall'origine e arriva dritto in $(n, 0, \dots, 0)$, per il quale $G((n, 0, \dots, 0) \geq \beta^n$, e ciò implica $1/\xi(\beta) \leq -\log \beta$. Assumendo per $\xi(\beta)$ un andamento del tipo

$$\xi(\beta) \sim (\beta_c - \beta)^{-\bar{\nu}}, \quad \text{per } \beta \rightarrow \beta_c^- \quad (1.78)$$

A questo punto, supponendo per $G(x; \beta)$ la forma in (1.18) ottenuta con l'ipotesi di scala, l'esponente di ξ sarà legato a γ dalla legge di scala $\gamma = \bar{\nu}(2 - \eta)$.

Possiamo adesso dare un'altra definizione di lunghezza di correlazione (chiamandola $\xi_2(\beta)$)

$$\xi_2^2(\beta) = \frac{\sum_x |x|^2 G(x; \beta)}{\sum_x G(x; \beta)} \quad (1.79)$$

Dimostreremo adesso che

$$\xi_2(\beta) \sim (\beta_c - \beta)^{-\nu}, \quad \text{per } \beta \rightarrow \beta_c^- \quad (1.80)$$

dove ν è lo stesso esponente di quello per i raggi definito in (1.69).

$$\begin{aligned} \sum_x |x|^2 G(x; \beta) &= \sum_N \beta^N \sum_x |x|^2 c_N(x) = \sum_N \beta^N c_N \langle R_e^2 \rangle \simeq \sum_N \beta^N N^{2\nu+\gamma-1} \mu^N \\ &= \sum_N N^{2\nu+\gamma-1} e^{-tN} \simeq \int_1^\infty x^{2\nu+\gamma-1} e^{-tx} dx \simeq t^{-2\nu-\gamma} \end{aligned} \quad (1.81)$$

dove, come prima $t = -\log(1 + \frac{\beta - \beta_c}{\beta_c}) \simeq \frac{\beta - \beta_c}{\beta_c}$ per $\beta \rightarrow \beta_c^-$. Quindi, ricordando la (1.76), si ha

$$\xi_2^2(\beta) \simeq \frac{t^{-2\nu-\gamma}}{\chi(\beta)} \simeq t^{-2\nu} \quad (1.82)$$

che prova l'affermazione.

Per ultima cosa ci rimane da provare che le due definizioni di lunghezza di correlazione sono consistenti, ovvero che $\nu = \bar{\nu}$. Si assuma per $G(x; \beta)$ la forma in (1.18). Allora

$$\begin{aligned} \sum_x |x|^2 G(x; \beta) &\approx \sum_x |x|^2 \frac{g(|x|/\xi)}{|x|^{d-2+\eta}} \approx \int_0^\infty r^{2+1-\eta} g(r/\xi) dr \\ &\sim \xi^{2+2-\eta} \sim (\beta_c - \beta)^{-(2+2-\eta)\bar{\nu}} = (\beta_c - \beta)^{-2\bar{\nu}+\gamma} \end{aligned} \quad (1.83)$$

dove si è usata la legge di scala $\gamma = (2 - \eta)\bar{\nu}$. Dividendo per $\chi(\beta) \sim (\beta_c - \beta)^{-\gamma}$ si ha perciò $\bar{\nu} = \nu$ come volevasi dimostrare. Si spiega così il nome ν dato all'esponente critico dei raggi.

Per completare la discussione sugli esponenti critici definiti fino ad ora, mostriamo che l'esponente critico α_{sing} per il SAW è uguale all'esponente critico α della parte singolare del calore specifico nel modello $\sigma(n = 0)$. In questo modello l'energia media per unità di volume è

$$\mathcal{E}(\beta) = \frac{1}{n} \langle \sum_{(0,x)} \varphi_0 \cdot \varphi_x \rangle = 2d \frac{1}{n} \langle \varphi_0 \cdot \varphi_e \rangle = 2d u(\beta) \quad (1.84)$$

dove e indica un sito primo vicino dell'origine mentre il fattore $2d$ può essere tralasciato nel seguito della discussione perchè irrilevante ai fini del comportamento critico di $\mathcal{E}(\beta)$. Il calore specifico è allora

$$C(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial u}{\partial \beta} \quad (1.85)$$

$u(\beta)$ può essere calcolata, nel limite $n \rightarrow 0$, usando l'espressione (1.59)

$$\begin{aligned} u(\beta) &= \sum_{N=1}^{\infty} \beta^N c_N(\epsilon) \simeq \sum_{N=1}^{\infty} e^{-tN} N^{\alpha_{sing}-2} = u_0 - \sum_{N=1}^{\infty} (1 - e^{-tN}) N^{\alpha_{sing}-2} \\ &\simeq u_0 - t^{1-\alpha_{sing}} \int_t^{\infty} dy (1 - e^{-y}) y^{\alpha_{sing}-2} \simeq u_0 - (\beta_c - \beta)^{1-\alpha_{sing}} \end{aligned} \quad (1.86)$$

dove $t = -\log(1 + \frac{\beta - \beta_c}{\beta_c}) \simeq \frac{\beta_c - \beta}{\beta_c}$ per $\beta \rightarrow \beta_c^-$, e l'integrale converge per $t \rightarrow 0$ a meno del caso $\alpha_{sing} = 1$ in cui si ha una divergenza logaritmica. In conclusione, dalla (1.85), si ha subito che $\alpha = \alpha_{sing}$. Questa proprietà di α_{sing} risulta comunque vera nei casi in cui ci sia una corrispondenza nel continuo fra un modello di cammini aleatori ed una teoria di campo interagente (ad esempio la $\lambda\phi^4$), che permetta di scrivere le funzioni di correlazione di quest'ultima come trasformate di Laplace delle funzioni di partizione dei cammini, e in cui si possa scrivere l'energia del sistema di campi come valore di aspettazione sul vuoto di un operatore ϕ^2 [10].

Sia c_{N_1, N_2} il numero delle coppie $(\omega^{(1)}, \omega^{(2)})$ tali che: $\omega^{(1)}$ è un cammino di N_1 passi che parte dall'origine, $\omega^{(2)}$ è un cammino di N_2 passi che parte da un sito qualsiasi, e $\omega^{(1)}$ e $\omega^{(2)}$ hanno almeno un sito in comune (cioè $\omega^{(1)} \cap \omega^{(2)} \neq \emptyset$). Per essa ci si aspetta un andamento

$$c_{N_1, N_2} \sim \mu^{N_1 + N_2} (N_1 N_2)^{(2\Delta_4 + \gamma - 2)/2} g(N_1/N_2) \quad (1.87)$$

per $N_1, N_2 \rightarrow \infty$, dove Δ_4 è ancora un altro esponente critico (universale) e g una funzione di scaling (anch'essa universale).

La quantità c_{N_1, N_2} è strettamente legata al secondo coefficiente del viriale. Per vederlo, si consideri una teoria generale in cui “molecole” di vario tipo interagiscono. Le molecole del tipo i abbiano S_i “stati interni”, così che lo stato completo di una tale molecola sia dato dalla coppia (x, s) dove $x \in \mathbf{Z}^d$ è la sua posizione e $s \in S_i$ è il suo stato interno. Assegnamo dei pesi statistici (o “fugacità”) $W_i(s)$ agli stati interni, normalizzandoli in modo che $\sum_{s \in S_i} W_i(s) = 1$; assegnamo inoltre un'energia di interazione $\mathcal{V}_{ij}((x, s), (x', s'))$ fra una molecola di tipo i in (x, s) ed una di tipo j in (x', s') . Allora il secondo coefficiente del viriale tra una molecola del tipo i ed una di tipo j è

$$B_2^{(ij)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{s \in S_i \\ s' \in S_j}} \sum_{x' \in \mathbf{Z}^d} W_i(s) W_j(s') \left[1 - e^{-\mathcal{V}_{ij}((0, s), (x', s'))} \right] \quad (1.88)$$

Tradotto in termini di cammini aleatori i tipi sono le differenti lunghezze N , gli stati interni sono le conformazioni di $\omega \in \mathcal{S}_N$ (dove ω parte dall'origine), i pesi statistici sono $W_N(\omega) = 1/c_N \quad \forall \omega \in \mathcal{S}_N$, e il potenziale di interazione è definito dalle caratteristiche del modello di cammino che si sta considerando (dal tipo di interazione presente fra punti diversi dello stesso cammino e fra cammini differenti).

Ad esempio per il SAW questo è di tipo “hard-core”

$$\mathcal{V}_{N, N'}((x, \omega), (x', \omega')) = \begin{cases} +\infty & \text{se } (\omega + x) \cap (\omega' + x') \neq \emptyset \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (1.89)$$

Segue immediatamente che

$$B_2^{(N_1, N_2)} = \frac{c_{N_1, N_2}}{2c_{N_1} c_{N_2}} \quad (1.90)$$

Nel caso del SAW, $B_2^{(N_1, N_2)}$ è quindi una misura del volume escluso tra coppie di cammini.

Un' altra quantità interessante è

$$g(\beta) = \xi(\beta)^{-d} \chi(\beta)^{-2} \sum_{N_1, N_2=0}^{\infty} c_{N_1, N_2} \beta^{N_1 + N_2}. \quad (1.91)$$

In teoria dei campi, l'analogo di $g(\beta)$ è chiamata costante d'accoppiamento rinormalizzata. Sostituendo (1.87) nella (1.91) si ottiene

$$g(\beta) \sim (\beta_c - \beta)^{d\nu - 2\Delta_4 + \gamma}, \quad \text{per } \beta \rightarrow \beta_c^- \quad (1.92)$$

Per il RW si sa che questa equazione è verificata con $d/2 - 2\Delta_4 + 1 = 0$ in $d = 2, 3, 4$ (con correzioni logaritmiche in quattro dimensioni) e $\Delta_4 = 3/2$ per $d \geq 5$. Un simile comportamento è atteso per il SAW: in $d = 2, 3, 4$ ci si aspetta che valga la seguente relazione di *hyperscaling* [11]

$$d\nu - 2\Delta_4 + \gamma = 0 \quad (1.93)$$

È inoltre noto che l'hyperscaling fallisce in $d > 4$ [12]. Definiamo ora una quantità *adimensionale* dividendo $B_2^{(N_1, N_2)}$ per una misura dell' estensione dei cammini e chiamiamola *rapporto di interpenetrazione*

$$\Psi \equiv 2 \left(\frac{d}{12\pi} \right)^{d/2} \frac{B_2^{(N, N)}}{\langle R_g^2 \rangle_N^{d/2}} = \left(\frac{d}{12\pi} \right)^{d/2} \frac{c_{N, N}}{c_N^2 \langle R_g^2 \rangle_N^{d/2}} \quad (1.94)$$

Ψ è, in pratica, una misura del grado di “durezza” del cammino in interazione con altri cammini. Ci si aspetta che Ψ_N tenda ad un valore universale Ψ^* nel limite $N \rightarrow \infty$; questa costante sarà diversa da zero solo se vale l'hyperscaling. Un argomento euristico che dà predizioni sulla validità o meno dell'hyperscaling è il seguente. La dimensione frattale di un SAW è $1/\nu$ e quindi due SAW indipendenti avranno una probabilità non nulla di intersecarsi se solo se la somma della loro dimensione frattale è grande almeno quanto la dimensione dello spazio in cui si trovano. Ci aspettiamo quindi che l'hyperscaling valga (la probabilità media di intersezione sia non nulla) se e solo se $1/\nu + 1/\nu \geq d$, cioè se $d\nu \leq 2$. Questo succede per $d < 4$ (per $d = 4$ ci dovrebbero essere violazioni logaritmiche).

Il RW (per il quale $\nu = 1/2$) non è un buon modello per polimeri in un “buon” solvente in soluzione diluita per i quali si osserva sperimentalmente $\nu \approx 0.59$; questo perchè il RW non tiene conto di una proprietà fondamentale: l'effetto di volume escluso che caratterizza l'interazione repulsiva fra i monomeri. Questa può essere pensata come repulsione “hard-core” ovverosia a causa del proprio volume essi non possono avvicinarsi più di tanto. Come visto nella sezione precedente il SAW tiene conto implicitamente di questo effetto: la catena risulta “gonfiata” rispetto al caso ideale (RW) e l'esponente ν è più elevato. I calcoli teorici basati sul modello $\sigma(n = 0)$ e le simulazioni Monte Carlo sul SAW danno come risultato $\nu \simeq 0.588$, in ottimo accordo con l'esperimento. In generale esistono comunque altri modelli, in cui la forma dell' interazione è diversa dai due casi sopra citati, che servono per descrivere polimeri in differenti situazioni (ad esempio in un solvente “povero”). Possiamo descrivere un modello generico definendo la forma del peso statistico da assegnare ad ogni cammino aleatorio. La funzione di partizione si scriverà

$$Z = \sum_{\omega} e^{-[U^c(\{\omega_i\}) + U^{int}(\{\omega_i\})]} \quad (1.95)$$

dove U^c è un termine ad un corpo

$$U^c(\{\omega_i\}) = \sum_{i=0}^N V_c(\omega_i) \quad (1.96)$$

essenzialmente indipendente dalla temperatura, mentre U^{int} è un termine di interazione fra i monomeri che può essere sviluppato in una somma di termini a due corpi, tre corpi, e così via. Per polimeri in un “buon” solvente solo il termine a due corpi appare rilevante e si può scrivere

$$U^{int}(\{\omega_i\}) = \sum_{i \neq j} V(\omega_i - \omega_j) \quad (1.97)$$

Per le simulazioni numeriche due modelli (appartenenti alla stessa classe di universalità) sono stati studiati in grande dettaglio: il modello di Domb-Joyce, definito dal peso statistico

$$W(\omega) = Z^{-1} \exp \left(-w \sum_{ij} \delta_{\omega_i, \omega_j} \right), \text{ con } w \geq 0 \quad (1.98)$$

e il SAW che si ottiene dal modello precedente facendo il limite $w \rightarrow +\infty$. Per lo studio del punto θ e della transizione da “buon” solvente a solvente “povero”, si è invece adottato un modello di SAW interagente (ISAW), con interazione attrattiva fra siti del cammino primi vicini non consecutivi. Il peso statistico è in questo caso

$$W(\omega) = Z^{-1} \exp(\beta \mathcal{E}[\omega]), \text{ con } \beta \geq 0 \quad (1.99)$$

dove $\mathcal{E}[\omega]$ è il numero di coppie di siti primi vicini (non consecutivi) che, per così dire, formano “legami energetici”. La qualità del solvente corrisponde all’intensità dell’interazione, ovvero al valore del parametro β . Esiste infatti un valore critico β_c che corrisponde al punto θ : per $\beta < \beta_c$ il modello rientra nella classe di universalità del SAW mentre per $\beta > \beta_c$ rientra nella classe di universalità dei polimeri densi (fase collassata) con indice critico $\nu = 1/d$. Possiamo definire adesso il numero $c_{N,\mathcal{E}}$ di cammini di N passi con \mathcal{E} legami energetici da cui si ha subito che $c_N = \sum_{\mathcal{E}} c_{N,\mathcal{E}}$. La funzione di partizione è definita come

$$Z_N(\beta) = \sum_{\mathcal{E}} c_{N,\mathcal{E}} \eta^{\mathcal{E}} \quad (1.100)$$

dove $\eta = e^{\beta}$. Nella somma il limite superiore per \mathcal{E} è, trascurando effetti dovuti agli estremi che diventano trascurabili per $N \rightarrow \infty$, dell’ordine di $(q-2)N/2$ dato che ogni sito del cammino può essere in contatto con non più di $(q-2)$ primi vicini non consecutivi. Usando il fatto che $\eta \geq 1$ si ha immediatamente che $c_N \leq Z_N(\beta) \leq c_N \eta^{(q-2)N/2}$. A questo punto si può definire la costante connettiva

$$\mu(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N^{1/N} \quad (1.101)$$

per la quale si avrà $\mu \leq \mu(\beta) \leq \mu \eta^{(q-2)/2}$. Il numero medio di legami energetici è

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{\sum_{\mathcal{E}} \mathcal{E} c_{N,\mathcal{E}} \eta^{\mathcal{E}}}{\sum_{\mathcal{E}} c_{N,\mathcal{E}} \eta^{\mathcal{E}}} = \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \log Z_N(\beta). \quad (1.102)$$

Nel limite $N \rightarrow \infty$, $\langle \mathcal{E} \rangle$ diventa proporzionale a N (si veda la definizione di $\mu(\beta)$ Eq. (1.101)) e l’energia media per link $\langle \mathcal{E} \rangle / N$ tende al limite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle \mathcal{E} \rangle}{N} = \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \log \mu(\beta). \quad (1.103)$$

Definiamo infine il calore specifico per link di un ISAW

$$C_N(\beta) \equiv \frac{1}{N} \frac{\partial \langle \mathcal{E} \rangle}{\partial T} = -\frac{\beta^2}{N} (\langle \mathcal{E}^2 \rangle - \langle \mathcal{E} \rangle^2) \quad (1.104)$$

che risulta avere un comportamento singolare, nel limite $N \rightarrow \infty$, per $\beta \rightarrow \beta_c$.

Differenti aspetti dei cammini aleatori possono essere studiati in quattro differenti ensembles:

- * Ensemble ad N fissato, x fissato (con spazio degli stati $\mathcal{S}_N(x)$)
- * Ensemble ad N fissato, x variabile (con spazio degli stati \mathcal{S}_N)
- * Ensemble ad N variabile, x fissato (con spazio degli stati $\mathcal{S}(x) \equiv \cup_{N=0}^{\infty} \mathcal{S}_N(x)$)
- * Ensemble ad N variabile, x variabile (con spazio degli stati $\mathcal{S} \equiv \cup_{N=0}^{\infty} \mathcal{S}_N$)

Gli ensembles a lunghezza fissata sono i più adatti per lo studio dell' esponente critico ν , mentre gli ensembles a lunghezza variabile sono preferibili per lo studio della costante connettiva μ e degli esponenti critici α_{sing} (estremo fisso) e γ (estremo libero).

Nel caso del SAW, si assegnano usualmente le seguenti distribuzioni di probabilità

- * N fissato, x fissato: $\pi(\omega) = \frac{1}{c_N(x)}$.
- * N fissato, x variabile: $\pi(\omega) = \frac{1}{c_N}$.
- * N variabile, x fissato: $\pi_{\beta,p}(\omega) = \frac{\beta^{|\omega|} |\omega|^p}{Z(\beta,p;x)}$ dove $Z(\beta,p;x) = \sum_{N=0}^{\infty} \beta^N N^p c_N(x)$ con $p \in \mathbf{R}$, $p \geq 0$ e β è la fugacità dei monomeri, $0 \leq \beta \leq \beta_c \equiv \frac{1}{\mu}$.
- * N variabile, x variabile: $\pi_{\beta,p}(\omega) = \frac{\beta^{|\omega|} |\omega|^p}{Z(\beta,p)}$ dove $Z(\beta,p) = \sum_{N=0}^{\infty} \beta^N N^p c_N$.

Come si vede tutti questi ensembles danno un egual peso statistico a cammini di una data lunghezza; in quelli a lunghezza variabile si ha considerevole libertà nella scelta dei pesi relativi per cammini di differente lunghezza. Fisicamente, gli ensembles ad estremo libero corrispondono ai polimeri lineari, mentre gli ensembles ad estremo fisso con $|x| = 1$ corrispondono ai polimeri ad anello.

1.5 Modello standard e teoria $\lambda\phi^4$

Un altro modello che tiene conto dell'effetto di volume escluso, e che di conseguenza è nella stessa classe di universalità del SAW, è il modello standard della teoria dei polimeri. Esso è definito mediante un integrale funzionale nel continuo. Nel caso ideale (catena Browniana) abbiamo dato un preciso senso all' espressione simbolica nel continuo (vedi Eq. (1.46),(1.45)). Nella teoria interagente, dopo l'introduzione dei regolarizzatori necessari, questo risultato può essere preso come punto di partenza per la teoria delle perturbazioni nelle costanti di accoppiamento dei termini di interazione (per polimeri in un "buon" solvente si considera solo un termine a due corpi mentre per lo studio del

punto θ si aggiunge anche un termine a tre corpi). Per il caso di polimeri in un “buon” solvente il modello è definito dalla funzione di partizione

$$Z_{st} = \int [\mathcal{D}\mathbf{r}(s)] \exp \left[-\frac{1}{4} \int_0^S ds \left(\frac{d\mathbf{r}}{ds} \right)^2 - \frac{b}{6} \int_0^S ds' \int_0^S ds'' \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')) \right] \quad (1.105)$$

dove $b > 0$ e $S = Na^2$ è la così detta “area” di un polimero di N monomeri (corrispondente ad un cammino di N passi su un reticolo con intervallo reticolare a). L’integrando rappresenta il peso statistico di un polimero modellizzato dalla curva continua $\mathbf{r}(s)$. Come si vede questo è l’analogo continuo del modello di Domb-Joyce; il termine di interazione a due corpi rappresenta infatti l’interazione monomero-monomero di volume escluso. L’interazione è caratterizzata dal parametro adimensionale $z = bS^{2-d/2}(2\pi)^{-d/2}$ che in $d > 4$ tende a zero per $S \rightarrow \infty$ (ovverosia l’interazione diventa irrilevante in $d > 4$). Ciò si spiega intuitivamente considerando l’effetto dell’interazione su una catena molto lunga come dovuto all’influenza di una parte della catena sull’altra. In prima approssimazione si può considerare ciascuna parte come una catena Browniana di dimensione 2, Dato che in $d > 4$ la probabilità che due catene Browniane si incontrino è nulla, l’interazione non avrà effetto in questo caso. Per $d \leq 4$ avrà invece un ruolo importante.

È facile riprodurre il risultato di Flory nell’ambito di questa teoria. Infatti, con un ragionamento di campo-medio che trascura le correlazioni, e assumendo che $|\mathbf{r}(s)| \sim s^\nu$ per grandi s , si ottiene

$$\left\langle \int_0^S ds \left(\frac{d\mathbf{r}}{ds} \right)^2 \right\rangle \sim S^{2\nu-1} \quad (1.106)$$

$$\left\langle \int_0^S ds' \int_0^S ds'' \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')) \right\rangle \sim S^{2-d\nu} \quad (1.107)$$

Richiedendo che entrambi i termini scalino con lo stesso esponente si ottiene nuovamente il risultato di Flory $\nu_{\text{Flory}} = 3/(d+2)$.

Mostreremo ora il collegamento presente fra modello standard e teoria $\lambda\phi^4$ nel continuo. Riscriviamo per prima cosa il termine di interazione come integrale gaussiano su un campo ausiliario $\sigma(\mathbf{r})$.

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\frac{b}{6} \int_0^S ds' \int_0^S ds'' \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')) \right] = \\ & = \int [\mathcal{D}\sigma(\mathbf{r})] \exp \left[\frac{3}{2g} \int d^d \mathbf{r} \sigma(\mathbf{r})^2 - \int ds \sigma(\mathbf{r}(s)) \right] \end{aligned} \quad (1.108)$$

dove si è assunta un’integrazione su campi σ immaginari. La funzione a due punti, in notazione continua, risulta

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}; t) & \equiv \int_0^\infty dS e^{-St} c_S(\mathbf{x}) = \\ & \int [\mathcal{D}\sigma(\mathbf{r})] \exp \left[\frac{3}{2g} \int d^d \mathbf{r} \sigma(\mathbf{r})^2 \right] \int_0^\infty dS e^{-St} \cdot \\ & \cdot \int_{\substack{\mathbf{r}(0)=0 \\ \mathbf{r}(S)=\mathbf{x}}} [\mathcal{D}\mathbf{r}(s)] \exp \left\{ -\int_0^S ds \left[\frac{1}{4} \left(\frac{d\mathbf{r}}{ds} \right)^2 + \sigma(\mathbf{r}(s)) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.109)$$

L'ultima linea è la rappresentazione di $\langle \mathbf{0} | \exp(-S\mathcal{H}) | \mathbf{x} \rangle$ con integrali di cammino, dove \mathcal{H} è l'Hamiltoniana quantistica

$$\mathcal{H} = -\Delta + \sigma(\mathbf{r}). \quad (1.110)$$

Quindi

$$G(\mathbf{x}; t) = \int [\mathcal{D}\sigma(\mathbf{r})] \exp \left[\frac{3}{2g} \int d^d \sigma(\mathbf{r})^2 \right] \langle \mathbf{0} | (-\Delta + t + \sigma(\mathbf{r}))^{-1} | \mathbf{x} \rangle. \quad (1.111)$$

Consideriamo adesso le funzioni di correlazione a due punti nella teoria $\lambda\phi^4$ con campo ad n componenti

$$\begin{aligned} & \int [\mathcal{D}\phi(\mathbf{r})] \phi(\mathbf{0}) \cdot \phi(\mathbf{x}) \exp \left[-\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} ((\partial_\mu \phi)^2 + t\phi^2 + \sigma(\mathbf{r})\phi^2) \right] = \\ & = n \langle \mathbf{0} | (-\Delta + t + \sigma(\mathbf{r}))^{-1} | \mathbf{x} \rangle [\det(-\Delta + t + \sigma(\mathbf{r}))]^{-n/2}. \end{aligned} \quad (1.112)$$

Sostituendo quest'espressione nella (1.111) ed effettuando l'integrale gaussiano si ottiene

$$G(\mathbf{x}; t) = \lim_{n \rightarrow 0} \left[\frac{1}{n} \langle \phi(\mathbf{0}) \cdot \phi(\mathbf{x}) \rangle \right] = \lim_{n \rightarrow 0} \int [\mathcal{D}\phi(\mathbf{r})] \frac{1}{n} (\phi(\mathbf{0}) \cdot \phi(\mathbf{x})) \exp[-S(\phi)] \quad (1.113)$$

dove

$$S(\phi) = \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + \frac{1}{2} t \phi^2 + \frac{g}{4!} (\phi^2)^2 \right] \quad (1.114)$$

è l'azione euclidea della teoria $\lambda\phi^4$.

Sfruttando questa corrispondenza, si sono potuti utilizzare, per il calcolo di quantità universali come ad esempio gli esponenti critici o i rapporti di ampiezze, tecniche di teoria dei campi come la ε -expansion e la g -expansion a dimensione fissata. I risultati più accurati per gli esponenti critici ν e γ in $d = 3$ sono stati ottenuti con la ε -expansion all'ordine $O(\varepsilon^5)$ tenendo conto dei risultati esatti in $d = 2$ [13]

$$\nu = 0.5879 \pm 0.0015, \quad \gamma = 1.1582 \pm 0.0032 \quad (1.115)$$

Comunque questi risultati sono meno accurati dei risultati Monte Carlo per gli stessi esponenti, ottenuti grazie ad algoritmi altamente efficienti che permettono di arrivare a cammini di $N \sim 10^5$ passi. I risultati più precisi al momento sono quindi

$$\begin{aligned} \nu &= \begin{cases} 0.5877 \pm 0.0006 & \text{da [11]} \\ 0.58758 \pm 0.00007 & \text{da [14]} \end{cases} \\ \gamma &= 1.1575 \pm 0.0006 \quad \text{da [15]} \end{aligned} \quad (1.116)$$

1.6 Risultati esatti per il SAW in $d = 2$

Anche in $d = 2$ sono stati stimati gli esponenti critici mediante ε -expansion (per $\varepsilon = 2$), ottenendo risultati compatibili con i valori esatti. Questi ultimi sono stati trovati utilizzando l'equivalenza fra diversi modelli, in modo da ricondursi ad uno risolvibile esattamente: il gas di Coulomb bidimensionale [16]. Esso è costituito da particelle con carica di tipo magnetico e di tipo elettrico in interazione mediante potenziale complesso di tipo logaritmico (parte reale per cariche dello stesso tipo e parte complessa per cariche di tipo diverso). Applicando al sistema tecniche di rinormalizzazione approssimate si

riescono a predire i suoi esponenti critici. Si parte con il modello $O(N)$ definito sul reticolo esagonale come segue. Ad ogni sito i del reticolo associamo un vettore \mathbf{s}_i ad N componenti con le seguenti proprietà stocastiche

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{s}_i^\alpha \rangle &= 0 \\ \langle \mathbf{s}_i^\alpha \mathbf{s}_j^\beta \rangle &= \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}.\end{aligned}\tag{1.117}$$

La funzione di partizione associata al modello è definita come

$$Z(\beta) = \left\langle \prod_{i,j} (1 + \beta \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j) \right\rangle \tag{1.118}$$

dove la produttoria è fatta su tutti i primi vicini del reticolo. Per $N = 1$ il modello si riduce al quello di Ising. Per ogni N possiamo ipotizzare che in vicinanza del valore critico $\beta_c(N)$, questo modello appartenga alla stessa classe di universalità del modello σ non lineare. Dalla corrispondente energia libera, $F(\beta) = -\ln Z(\beta)$, possiamo dedurre gli esponenti critici ν e ω . Infatti, nella regione critica, la parte singolare $F_s(\beta)$ di $F(\beta)$ ha la forma

$$F_s(\beta) \simeq |\beta - \beta_c|^{2\nu} (f_1 + f_2 |\beta - \beta_c|^{\omega\nu} + \dots). \tag{1.119}$$

Inoltre, dalla funzione di correlazione a due punti $\langle \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \rangle$, che è rappresentata come somma dei diagrammi costituiti da cammini aleatori self-avoiding che congiungono il sito i con il sito j e da poligoni chiusi, è possibile ricavare l'esponente magnetico $2X_m^{O(N)} = \eta$ del modello $O(N)$

$$\langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle \sim 1/|i - j|^{2X_m^{O(N)}} \tag{1.120}$$

Questo è stato fatto partendo dal modello $O(N)$ e stabilendo una corrispondenza con il modello “solid-on-solid” (SOS). Per prima cosa si noti che Z può essere espressa, sviluppando in serie di β , come somma di grafici ciascuno dei quali è costituito da P di poligoni chiusi disegnati sul reticolo per un numero totale B di link

$$Z(\beta)_N = \sum_{\mathcal{C}} \beta^{B(\mathcal{C})} N^{P(\mathcal{C})} \tag{1.121}$$

Passiamo adesso al modello “solid-on-solid”. Ad ogni grafico \mathcal{C} possiamo associare $2^{P(\mathcal{C})}$ grafici ottenuti orientando i poligoni di \mathcal{C} in tutti i modi possibili. Adesso, ciascun dominio limitato da un poligono orientato può essere visto come una terrazza di altezza h intera. Due terrazze separate da un poligono hanno altezze che differiscono di un unità in accordo con la seguente regola: seguendo un poligono lungo la sua direzione la terrazza più alta sta sulla destra mentre quella più bassa sulla sinistra. Si attribuisce allora un fattore $\beta e^{i\alpha}$ ad ogni sito dove il cammino gira a destra e $\beta e^{-i\alpha}$ nel caso opposto. Il contributo di un poligono, di b link, è il prodotto dei contributi associati a tutti i siti che gli appartengono, e risulta quindi del tipo $\beta^b e^{i6\alpha}$ o $\beta^b e^{-i6\alpha}$. La funzione di partizione risulta quindi

$$Z'(\beta) = \sum_{\mathcal{C}} \beta^{B(\mathcal{C})} (e^{i6\alpha} + e^{-i6\alpha})^{P(\mathcal{C})} \tag{1.122}$$

Confrontando Eq. (1.121) con Eq. (1.122) vediamo che deve essere $N = 2 \cos 6\alpha$ se vogliamo che le due funzioni di partizione siano uguali.

A questo punto, sfruttando due nuove equivalenze, una fra modelli SOS e modelli “orologio”, i quali sono una generalizzazione del modello $X - Y$ (al quale si aggiunge un termine che tiene conto del campo cristallino sugli spin di un reticolo), e un'altra fra modelli “orologio” e gas di Coulomb, si arriva a quella desiderata fra modello $O(N)$ e gas di Coulomb. I risultati per $-2 < N < 2$ sono nella forma parametrica

$$\begin{aligned} N &= -2 \cos(2\pi\tau) \\ \frac{1}{\nu} &= 4 - \frac{2}{\tau} \\ \omega &= -6 + \frac{6}{\tau} \\ \eta &= 2 - \frac{3\tau}{2} - \frac{1}{2\tau} \end{aligned} \tag{1.123}$$

Per il caso $N = 0, \tau = 3/4$ si ha

$$\nu = \frac{3}{4}, \quad \omega = 2, \quad \eta = \frac{5}{24}, \tag{1.124}$$

$$\gamma = (2 - \eta)\nu = \frac{43}{32} \quad (= 1.34375) \tag{1.125}$$

che confermano le formule già predette da Cardy e Hamber [17].

Capitolo 2

Algoritmi Monte Carlo per il SAW

In questo capitolo introduciamo alcune nozioni generali sugli algoritmi Monte Carlo, con particolare riguardo a quelli usati nello studio del self-avoiding walk. I metodi Monte Carlo possono essere classificati come statici, quasi statici o dinamici. I metodi **Statici** generano una sequenza di campioni *statisticamente indipendenti* dalla desiderata distribuzione di probabilità π . Quelli **Quasi-statici** generano una sequenza di *pacchetti* di campioni statisticamente indipendenti dalla distribuzione π ; le correlazioni all'interno di un pacchetto essendo spesso difficili da stimare. Infine i metodi **Dinamici** generano una sequenza di campioni correlati da un *processo stocastico* (di solito una catena di Markov) che ha la distribuzione cercata π come sua unica distribuzione d'equilibrio.

2.1 Metodi Monte Carlo Statici

Consideriamo un sistema con spazio delle configurazioni S (per comodità lo assumiamo discreto). Sia $\pi = \{\pi_x\}_{x \in S}$ una distribuzione di probabilità su S , e $A = \{A(x)\}_{x \in S}$ un osservabile a valori reali. Lo scopo è quello di stimare il valore di aspettazione

$$\langle A \rangle_\pi \equiv \sum_{x \in S} \pi_x A(x). \quad (2.1)$$

Il metodo più diretto è quello di generare casualmente campioni indipendenti X_1, \dots, X_n dalla distribuzione π , usando la media campione

$$\bar{A} \equiv \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(X_i) \quad (2.2)$$

come stima di $\langle A \rangle_\pi$. Questa stima non è affetta da errori sistematici (è “unbiased”) ovvero $\langle \bar{A} \rangle_\pi = \langle A \rangle_\pi$ e la sua varianza è

$$\text{var}_\pi(\bar{A}) \equiv \langle \bar{A}^2 \rangle_\pi - \langle \bar{A} \rangle_\pi^2 = \frac{1}{n} \text{var}_\pi(A) \equiv \frac{1}{n} [\langle A^2 \rangle_\pi - \langle A \rangle_\pi^2] \quad (2.3)$$

È anche possibile generare campioni X_1, \dots, X_n da un'altra distribuzione di probabilità ν , usando poi i *pesi* $W(x) \equiv \frac{\pi_x}{\nu_x}$. Questo perchè in pratica può essere difficile generare efficientemente campioni casuali da π e quindi si deve campionare da una distribuzione più semplice ν oppure perchè si vuole migliorare l'efficienza (cioè ridurre la

varianza) campionando da una distribuzione scelta appositamente. Il caso più comune in meccanica statistica è quello in cui $W(x)$ è noto, a meno di una costante moltiplicativa di normalizzazione sconosciuta (ad esempio $\pi_x = Z_\beta^{-1} e^{-\beta H(x)}$ e $\nu_x = Z_{\beta'}^{-1} e^{-\beta' H(x)}$ con $W(x) = Z_{\beta'}/Z_\beta e^{-(\beta-\beta')H(x)}$ dove non si conosce $Z_{\beta'}/Z_\beta$). In questo caso possiamo usare

$$\bar{A}^{(W, ratio)} \equiv \frac{\sum_{i=1}^n W(X_i) A(X_i)}{\sum_{i=1}^n W(X_i)}. \quad (2.4)$$

Questa stima è affetta da un piccolo errore sistematico: usando l'approssimazione di piccole fluttuazioni si ha

$$\left\langle \frac{Y}{Z} \right\rangle \approx \frac{\langle Y \rangle}{\langle Z \rangle} \left[1 - \frac{\text{cov}(X, Z)}{\langle Y \rangle \langle Z \rangle} + \frac{\text{var}(Z)}{\langle Z \rangle^2} \right], \quad (2.5)$$

otteniamo

$$\langle \bar{A}^{(W, ratio)} \rangle_\pi = \langle A \rangle_\pi - \frac{1}{n} [\langle W A \rangle_\pi - \langle W \rangle_\pi \langle A \rangle_\pi] + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (2.6)$$

Dato che l'errore sistematico è dell'ordine di $1/n$ mentre la deviazione standard è dell'ordine di $1/\sqrt{n}$, esso è normalmente trascurabile rispetto alle fluttuazioni statistiche. La varianza può anche essere calcolata con l'approssimazione di piccole fluttuazioni

$$\text{var}\left(\frac{Y}{Z}\right) \approx \frac{\langle Y \rangle^2}{\langle Z \rangle^2} \text{var}\left(\frac{Y}{\langle Y \rangle} - \frac{Z}{\langle Z \rangle}\right) \quad (2.7)$$

$$\approx \frac{\text{var}(Y)}{\langle Z \rangle^2} - \frac{2\langle Y \rangle}{\langle Z \rangle^3} \text{cov}(Y, Z) + \frac{\langle Y \rangle^2}{\langle Z \rangle^4} \text{var}(Z); \quad (2.8)$$

e risulta

$$\text{var}_\pi(\bar{A}^{(W, ratio)}) = \frac{1}{n} \left\langle W(A - \langle A \rangle_\pi)^2 \right\rangle_\pi + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (2.9)$$

La scelta ottimale di ν è quella che minimizza $\langle W(A - \langle A \rangle_\pi)^2 \rangle_\pi$ soggetta al vincolo $\langle W^{-1} \rangle_\pi = 1$

$$W(x)^{-1} = \frac{|A(x) - \langle A \rangle_\pi|}{\sum_{x \in S} \pi_x |A(x) - \langle A \rangle_\pi|}. \quad (2.10)$$

Dato che $\langle W \rangle_\pi - 1 = \langle W^2 \rangle_\nu - \langle W \rangle_\nu^2 \equiv \text{var}_\nu(W) \geq 0$ questa quantità misura la “diversità” fra ν e π . Assumendo che A sia un osservabile limitato ($|A(x)| \leq M \forall x \in S$) e usando la disuguaglianza di Schwartz è immediato ottenere

$$\text{var}_\pi(\bar{A}^{(W, ratio)}) \leq \frac{4M^2}{n} \langle W \rangle_\pi + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (2.11)$$

Quindi la varianza non può essere grande a meno che $\langle W \rangle_\pi \gg 1$, cioè ν sia molto differente da π ; questo si spiega euristicamente col fatto che configurazioni “tipiche” per π sono “rare” per ν e quindi il numero *effettivo* di misure è molto più piccolo del numero *totale* di misure del campione.

Il principale problema dei metodi statici per i SAWs nel regime critico è l'attrito esponenziale su grandi campioni: il tempo di CPU, necessario per generare una nuova configurazione, cresce esponenzialmente con N . L'esempio più semplice di algoritmo statico è il “campionamento semplice” in cui per generare campioni da π nell'ensemble ad N

fissato, x variabile si generano prima random walks *ordinari*, da $\nu = (2d)^{-N} \forall \omega$, e dopo si applicano i pesi $W(\omega) = \frac{\pi_\omega}{\nu_\omega}$. Dato che

$$\langle W \rangle_\pi = \frac{(2d)^N}{c_N} \approx \left(\frac{2d}{\mu} \right)^N N^{1-\gamma} = e^{\lambda N} N^{1-\gamma}, \text{ dove } \lambda = \log(2d/\mu) \quad (2.12)$$

cresce esponenzialmente con N , l'efficienza dell'algoritmo deteriora molto velocemente (la probabilità di successo è uguale a $c_N/(2d)^N$ e quindi il numero medio di tentativi richiesto per generare un SAW di N passi è proprio $\langle W \rangle$). In tre dimensioni $\lambda = 0.248$, così già per $n \gtrsim 15-20$ questo metodo diventa terribilmente lento. Modificazioni di questo algoritmo, come quella che genera ogni step successivo in una direzione non opposta a quella corrente (non-reversal sampling) o quella che prova a concatenare cammini più piccoli fatti da r passi con un vincolo di non inversione, possono ridurre decisamente la costante d'attrito λ senza però riuscire a evitare la crescita esponenziale dell'attrito. Si può poi provare, come nel *Rosenbluth-Rosenbluth* [18], a campionare secondo la distribuzione di probabilità $\nu(\omega) = \text{cost} \prod_{i=1}^N \frac{1}{k_i}$, dove k_i è il numero di primi vicini, del sito ω_i , non occupati (ogni passo è scelto solo tra quelli permessi). Ogni cammino va quindi pesato con $W(\omega) = \nu^{-1}$. Questo algoritmo ha ancora un attrito esponenziale a causa degli intrappolamenti che possono capitare ai siti con $i < N$ e dai quali il cammino non può uscire. Inoltre, dato che la distribuzione di probabilità differisce sensibilmente da quella uniforme, ci sono pochi pesi molto più grandi di tutti gli altri, e la varianza è decisamente più alta rispetto a quello che ci si aspetterebbe dalle dimensioni del campione.

Un considerevole miglioramento è rappresentato dall'algoritmo di *dimerizzazione* [19]: per costruire un cammino di N passi si generano due cammini indipendenti di $N/2$ passi e si tenta di concatenarli. Se il cammino risultante non è self-avoiding, i cammini sono entrambi rigettati e la mossa è ripetuta. La procedura è ripetuta ricorsivamente, finché la lunghezza dei cammini costituenti non è inferiore ad una soglia prestabilita N_0 , sotto la quale i cammini sono costruiti con il simple sampling. La probabilità di concatenare con successo due cammini di lunghezza $N/2$ è

$$p_N = \frac{c_N}{(c_{N/2})^2} \approx B^{-1} N^{-(\gamma-1)} \quad (2.13)$$

e il tempo di CPU necessario per generare una configurazione di lunghezza N è $T_N \approx BN^{\gamma-1} 2T_{N/2}$. Dato che il processo di dimerizzazione impiega un numero $k = \log_2 \left(\frac{N}{N_0} \right)$ di tentativi, si ottiene

$$\begin{aligned} T_N &\approx \frac{(2BN^{\gamma-1})^k}{2^{(\gamma-1)k(k-1)/2}} T_{N_0} \\ &= C_0 N^{C_1 \log_2 N + C_2}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$C_0 = C_0(N_0), \quad (2.15)$$

$$C_1 = \frac{\gamma-1}{2}, \quad (2.16)$$

$$C_2 = \frac{\gamma-1}{2} + \log_2(2B). \quad (2.17)$$

L'attrito è polinomiale per $d > 4$, ha un comportamento $N^{\log(\log(N))}$ per $d = 4$ e $N^{C_1 \log(N)}$ per $d < 4$. La bassa efficienza dei metodi statici e la difficoltà nello stimare la reale efficienza statistica dei metodi quasi statici (per i quali si ha comunque solo un piccolo miglioramento rispetto ai primi) aumenta l'interesse per i metodi dinamici.

2.2 Metodi Monte Carlo Dinamici

L'idea dei metodi dinamici è quella di inventare un *processo stocastico* con spazio degli stati S che abbia π come sua unica distribuzione d'equilibrio. Si simula poi questo processo, partendo da un'arbitraria configurazione iniziale; una volta che il sistema ha raggiunto l'equilibrio, si misurano le medie temporali, che convergono (quando il tempo della simulazione tende all'infinito) alle medie d'ensemble. In pratica il processo stocastico è sempre un *processo di Markov*, cioè una sequenza $\{X_n\}$, $X_n \in S$, dove X_{n+1} dipende solo da X_n in quanto successive transizioni sono indipendenti. La catena di Markov è completamente definita fissando una *distribuzione iniziale* α , tale che $P(X_0 = x) = \alpha_x$, ed una matrice delle probabilità di transizione $P = \{p(x \rightarrow y)\} = \{p_{xy}\}$, che specifica la probabilità condizionata che il sistema sia nello stato y al tempo n se era nello stato x al tempo $n-1$, $P(X_n = y | X_{n-1} = x) = p_{xy}$, con le proprietà usuali $p_{xy} \geq 0$, $\sum_y p_{xy} = 1$. La probabilità congiunta è

$$P\{X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n\} = \alpha_{x_0} p_{x_0 x_1} \dots p_{x_{n-1} x_n}. \quad (2.18)$$

La matrice di transizione in n -passi, che definisce la probabilità di andare da uno stato x ad uno stato y in n passi, è chiaramente $P\{X_m = y | X_{m+n}\} = p_{xy}^{(n)} = \{P^n\}_{xy}$. Due proprietà devono essere soddisfatte per campionare lo spazio degli stati in accordo ad una certa distribuzione di probabilità. La prima è l'*irriducibilità* (o *ergodicità*): per ogni coppia di stati $x, y \in S$ esiste un intero n tale che $p_{xy}^{(n)} > 0$. Questa proprietà assicura che non ci siano regioni di S che non vengano campionate dal processo di Markov. Dobbiamo anche richiedere che il processo generi la corretta distribuzione di probabilità all'equilibrio, ovvero la distribuzione π deve essere una *distribuzione stazionaria* per la catena di Markov. Questo significa che per $\forall y \in S$ si deve avere

$$\sum_x \pi_x p_{xy} = \pi_y. \quad (2.19)$$

Ergodicità e convergenza all'equilibrio assicurano che la media di un'osservabile lungo la catena dia asintoticamente l'esatto valore medio rispetto a π cioè

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n O(X_i) \rightarrow \sum_{x \in S} \pi_x O(x), \quad \text{per } n \rightarrow \infty. \quad (2.20)$$

Una catena di Markov irriducibile è detta *periodica* di periodo p se p è il massimo comun divisore di $\{m : p_{xx}^{(m)} > 0\}$ per ogni stato x (o equivalentemente per almeno uno stato x). Una catena di periodo 1 è detta *aperiodica* (nota che se una catena irriducibile ha $p_{xx} > 0$ per qualche x , allora è aperiodica). La teoria standard delle catene di Markov ci dice che per una catena irriducibile aperiodica

$$\exists! \lim_{n \rightarrow \infty} P_{xy}^n = \pi_y, \quad \text{indipendente da } x \in S \quad (2.21)$$

Inoltre π è l'unica soluzione *non negativa* di (2.19) con la codizione $\sum_{x \in S} \pi_x = 1$. Un caso speciale in cui vale automaticamente la proprietà (2.19) è quello in cui si ha

$$\pi_x p_{xy} = \pi_y p_{yx}, \quad \forall x, y \in S. \quad (2.22)$$

Questa equazione è chiamata condizione del bilancio dettagliato e dice che la catena di Markov è reversibile, nel senso che all'equilibrio la probabilità di saltare nello stato y ,

essendo nello stato x , è la stessa che per il caso opposto. Questa condizione è di grande utilità pratica nel costruire un algoritmo Monte Carlo per modelli di meccanica statistica e di teoria dei campi.

Uno dei più semplici ed usati algoritmi che verifica la (2.22) fu introdotto da Metropolis *et al.* [20] in 1953 e modificato leggermente in una forma più generale da Hastings [21]. La catena di Markov è costruita nella seguente maniera: partendo da una matrice irriducibile arbitraria $P^{(0)} = \{p_{xy}^{(0)}\}$ e da una probabilità di accettazione a_{xy} , si definisce una dinamica stocastica sull'insieme degli stati S con

$$\begin{aligned} p_{xy} &= p_{xy}^{(0)} a_{xy} && \text{se } x \neq y, \\ p_{xx} &= p_{xx}^{(0)} + \sum_{y \neq x} p_{xy}^{(0)} (1 - a_{xy}) && \text{altrimenti.} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Richiedendo che l'Eq. (2.22) sia soddisfatta, si ottiene la condizione

$$\frac{a_{xy}}{a_{yx}} = \frac{\pi_y p_{yx}^{(0)}}{\pi_x p_{xy}^{(0)}}, \quad \forall x \neq y. \quad (2.24)$$

Quest'ultima relazione può essere soddisfatta definendo

$$a_{xy} = F\left(\frac{\pi_y p_{yx}^{(0)}}{\pi_x p_{xy}^{(0)}}\right) \quad (2.25)$$

dove $F : [0, +\infty] \rightarrow [0, 1]$ è una funzione che soddisfa alla condizione

$$\frac{F(z)}{F(\frac{1}{z})} = z, \quad \forall z \in [0, \infty]. \quad (2.26)$$

La scelta Metropolis corrisponde a

$$F_{met}(z) = \min(z, 1). \quad (2.27)$$

Questa è la scelta ottimale nel senso che ogni altra funzione F soddisfacente Eq. (2.26) è tale che $F(z) \leq F_{met}(z)$. Una volta che la dinamica è costruita, bisogna verificare l'irriducibilità di P . Se la matrice $P^{(0)}$ è simmetrica, Eq. (2.25) si semplifica: essa diventa $a_{xy} = F(\pi_y/\pi_x)$. Un esempio molto comune che ci sarà utile successivamente è quello di un sistema di meccanica statistica la cui distribuzione d'equilibrio è data dalla misura di Gibbs $\pi_x = e^{-\beta E_x}/Z$, dove E_x è l'energia dello stato x e Z è la funzione di partizione. Allora, sempre con $P^{(0)}$ simmetrica,

$$a_{xy} = F(e^{-\beta \Delta E}), \quad \text{dove } \Delta E = E_y - E_x. \quad (2.28)$$

Con la scelta Metropolis $F_{met}(z)$ abbiamo:

- una mossa per la quale $\Delta E \leq 0$ viene sempre accettata;
- una mossa per la quale $\Delta E \geq 0$ viene accettata con una probabilità $e^{-\beta \Delta E}$.

Consideriamo ora una catena di Markov *stazionaria* (iniziando il processo nella distribuzione di equilibrio π o equivalentemente lasciando “termalizzare” il sistema per un

lungo tempo prima di osservarlo) e sia $A = \{A(x)\}_{x \in S}$ un'osservabile a valori reali. Allora $\{A_t\} \equiv \{A(X_t)\}$ è un processo stocastico stazionario con media

$$\mu_A \equiv \langle A_t \rangle = \sum_{x \in S} \pi_x A(x) \quad (2.29)$$

e funzione di correlazione (non normalizzata)

$$\begin{aligned} C_{AA}(t) &\equiv \langle A_s A_{s+t} \rangle - \mu_A^2 \\ &= \sum_{x, y \in S} A(x) [\pi_x p_{xy}^{(t)} - \pi_x \pi_y] A(y). \end{aligned} \quad (2.30)$$

La funzione di autocorrelazione normalizzata è allora

$$\rho_{AA} \equiv C_{AA}(t)/C_{AA}(0). \quad (2.31)$$

Tipicamente essa decade in modo esponenziale ($\sim e^{-|t|/\tau}$) per grandi t ; si definisce quindi *tempo di autocorrelazione esponenziale*

$$\begin{aligned} \tau_{exp,A} &= \limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{t}{-\log |\rho_{AA}(t)|} \quad \text{e} \\ \tau_{exp} &= \sup_A \tau_{exp,A}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Quindi, τ_{exp} è il tempo di rilassamento del più lento modo del sistema. (può essere anche $+\infty$) e dà un'ordine di grandezza per il transiente iniziale durante il quale avviene la termalizzazione. Calcolare τ_{exp} non è un semplice problema e di solito si stima un limite superiore $\hat{\tau}_{exp}$ e si rigettano le prime $m \sim 20\hat{\tau}_{exp}$ iterazioni prima di iniziare il campionamento [22].

Una teoria matematica rigorosa delle proprietà di convergenza di un algoritmo è basata sullo studio dello spettro della matrice probabilità di transizione P , che agisce sullo spazio di Hilbert delle funzioni a quadrato sommabile rispetto alla misura π ($l^2(\pi)$). Dalla definizione di P si possono dimostrare le seguenti proprietà:

- l'operatore P è una contrazione.
- 1 è un autovalore semplice di P , così come della sua aggiunta P^* , con autovettore uguale alla funzione costante $\mathbf{1}$.
- se la catena di Markov è aperiodica, allora 1 è l'unico autovalore di P (e di P^*) sul disco unitario.
- sia R il *raggio spettrale* di P che agisce sul complemento ortogonale della funzione costante:

$$R \equiv \inf \left\{ r : \text{spec}(P|_{\mathbf{1}^\perp}) \subset \{\lambda : |\lambda| \leq r\} \right\}. \quad (2.33)$$

Allora $R = e^{-1/\tau_{exp}}$.

Le prime tre proposizioni sono un versione generalizzata del teorema di Frobenius-Perron, l'ultima è una conseguenza della formula del raggio spettrale.

Se P soddisfa il bilancio dettagliato allora è autoaggiunta. In questo caso gli autovalori di P sono reali e appartengono all'intervallo chiuso $[-1, 1]$. Se chiamiamo

$$\lambda_{min} = \inf \text{spec}(P|_{\mathbf{1}^\perp}), \quad (2.34)$$

$$\lambda_{max} = \sup \text{spec}(P|_{\mathbf{1}^\perp}), \quad (2.35)$$

si ha

$$\tau_{exp} = \frac{-1}{\log \max[\lambda_{min}, \lambda_{max}]}. \quad (2.36)$$

Se si definisce la distanza tra misure di probabilità in $l^2(\pi)$ come

$$d_2(\nu; \mu) \equiv \left\| \frac{\nu}{\mu} - 1 \right\|_{l^2(\pi)} = \sup_{\|f\|_{l^2(\pi)} \leq 1} \left| \int [d\nu]f - \int [d\mu]f \right|, \quad (2.37)$$

allora, asintoticamente la distanza dall' equilibrio dopo t passi è

$$d_2(\alpha P^t; \pi) \leq \|P^t|_{1^\perp}\| d_2(\alpha; \pi) \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau_{exp}}\right). \quad (2.38)$$

Oltre al tempo esponenziale di autocorrelazione $\tau_{exp,A}$, possiamo anche definire il *tempo integrato di autocorrelazione* $\tau_{int,A}$. Mentre $\tau_{exp,A}$ è rilevante per la termalizzazione, $\tau_{int,A}$ è la quantità che controlla le barre d'errore delle stime Monte Carlo. Esso è definito come

$$\tau_{int,A} = \frac{1}{2} \sum_{s=-\infty}^{+\infty} \rho_{AA}(s) = \frac{1}{2} + \sum_{s=1}^{+\infty} \rho_{AA}(s) \quad (2.39)$$

dove il fattore $1/2$ è introdotto per convenzione (è inserito affinché $\tau_{int,A} \approx \tau_{exp,A}$ se $\rho_{AA}(t) \sim e^{-|t|/\tau_{exp,A}}$ con $\tau_{exp,A} \gg 1$) La stima della media d'ensemble $\langle A \rangle$ è ovviamente la media campione

$$\bar{A} = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n A_t \quad (2.40)$$

che ha varianza

$$\begin{aligned} \text{var}(\bar{A}) &= \frac{1}{n^2} \sum_{r,s=1}^n C_{AA}(r-s) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{s=-(n-1)}^{n-1} \left(1 - \frac{|s|}{n}\right) C_{AA}(s) \\ &\approx \frac{1}{n} (2\tau_{int,A}) C_{AA}(0), \text{ per } n \gg \tau. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Dato che $\frac{1}{n} C_{AA}(0)$ è la varianza nel caso di campionamento indipendente, Eq. (2.41) può essere interpretata dicendo che il numero di misure effettivamente indipendenti nella catena di Markov è $n/2\tau_{int,A}$.

Il tempo di autocorrelazione integrato (essendo la varianza di \bar{A} proporzionale a $\tau_{int,A}$) gioca un ruolo cruciale nello studio dell' *efficienza computazionale* dell'algoritmo. Quando due differenti Monte Carlo calcolano $\langle A \rangle$ per un certo osservabile A , il più efficiente è quello per cui $2\tau_{int,A} T_{CPU}$ è più piccolo, dove T_{CPU} è il tempo di CPU necessario per un iterazione. In generale si osserva per $2\tau_{int,A} T_{CPU}$ un comportamento del tipo ξ^z dove ξ è la lunghezza di correlazione statica per il sistema studiato. Nel nostro caso il ruolo di lunghezza di correlazione spetta ad una qualsiasi delle osservabili che misurano l'estensione media dei SAWs (vedi pagina 16), e che hanno un comportamento critico governato dall'esponente ν . Di conseguenza $2\tau_{int,A} T_{CPU} \sim N^{\nu z} \sim N^p$. L'esponente p governa quindi il *rallentamento critico* man mano che ci si avvicina alla regione critica ed è chiamato esponente critico dinamico dell'algoritmo (nel seguito, per denotare l'esponente critico dinamico nel caso del SAW useremo il simbolo z al posto di p).

N.B. Nei capitoli successivi avremo a che fare solamente con algoritmi bilocali, per i quali $T_{CPU} = O(1)$ (ovvero indipendente da N). In questo caso T_{CPU} non è di alcun interesse dato che rappresenta una costante moltiplicativa ininfluyente sull'esponente dinamico dell'algoritmo.

Comunemente è assunto che $\tau_{exp,A}$ e $\tau_{int,A}$ sono dello stesso ordine di grandezza, almeno per osservabili “ragionevoli” A . Ma questo *non* è vero in generale. Infatti ci si aspetta che la funzione di autocorrelazione $\rho_{AA}(t)$ obbedisca ad una legge dinamica di scala [23] della forma

$$\rho_{AA}(t; \beta) \approx |t|^{-a} F\left((\beta - \beta_c)^b |t|\right) \quad (2.42)$$

valida nel limite

$$\beta - \beta_c \rightarrow 0, \quad |t| \rightarrow \infty, \quad x \equiv (\beta - \beta_c)^b |t| \text{ fissato.} \quad (2.43)$$

$a, b > 0$ sono esponenti critici dinamici e F è una funzione di scaling; β è un parametro corrispondente alla temperatura (ad esempio $\frac{1}{N}$ per il SAW), e β_c è il suo valore al punto critico. Supponendo che F sia continua e strettamente positiva e che decada rapidamente (ad esempio esponenzialmente) per $|x| \rightarrow \infty$, non è difficile mostrare che

$$\tau_{exp,A} \sim |\beta - \beta_c|^{-b}, \quad \tau_{int,A} \sim |\beta - \beta_c|^{-(1-a)b}, \quad (\text{se } a < 1), \quad \rho_{AA}(t; \beta = \beta_c) \sim |t|^{-a} \quad (2.44)$$

e quindi $\tau_{int,A}$ e $\tau_{exp,A}$ hanno differenti esponenti critici a meno che $a = 0$. Questo è analogo a quello che succede nei fenomeni critici statici sostituendo “tempo” con “spazio”: $\tau_{exp,A}$ è l'analogo della lunghezza di correlazione, mentre $\tau_{int,A}$ è l'analogo della suscettibilità; (2.44) sono il corrispondente della ben nota legge di scala $\gamma = (2 - \eta)\nu$ dove $\gamma \neq \nu$ in generale.

Sempre nel caso in cui la catena sia reversibile, e quindi \mathcal{P} sia autoaggiunta, segue dal teorema spettrale che la funzione di autocorrelazione $C_{AA}(t)$ ha una rappresentazione spettrale

$$C_{AA}(t) = \int_{-1}^{+1} \lambda^{|t|} d\sigma_{AA}(\lambda), \quad (2.45)$$

dove $d\sigma_{AA}$ è una misura supportata sull'intervallo $[-e^{-1/\tau_{exp,A}}, e^{-1/\tau_{exp,A}}]$. Ne segue che

$$\tau_{int,A} \leq \frac{1}{2} \left(\frac{1 + e^{-1/\tau_{exp,A}}}{1 - e^{-1/\tau_{exp,A}}} \right) \leq \frac{1}{2} \left(\frac{1 + e^{-1/\tau_{exp}}}{1 - e^{-1/\tau_{exp}}} \right) \approx \tau_{exp}. \quad (2.46)$$

Discutiamo ora come stimare $\tau_{int,A}$ (vedi ad esempio [24]). La stima “naturale” per la funzione di autocorrelazione è

$$\hat{C}(t) = \frac{1}{n - |t|} \sum_{i=1}^{n-|t|} (A_i - \mu_A)(A_{i-|t|} - \mu_A), \quad (2.47)$$

se la media è nota e

$$\hat{\bar{C}}(t) = \frac{1}{n - |t|} \sum_{i=1}^{n-|t|} (A_i - \bar{A})(A_{i-|t|} - \bar{A}), \quad (2.48)$$

se la media è incognita. $\hat{C}(t)$ è una stima “unbiased” mentre $\hat{\hat{C}}(t)$ è leggermente “biased” (dell’ordine di $O(1/n)$). La loro varianza è identica al primo ordine in $1/n$:

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{C}(t)) &= \frac{1}{n} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [C^2(m) + C(m+t)C(m-t) + \kappa(t, m, m+t)], \\ \kappa(t, m, m+t) &\equiv \langle (A_i - \mu_A)(A_{i+t} - \mu_A)(A_{i+m} - \mu_A)(A_{i+m+t} - \mu_A) \rangle. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Possiamo adesso definire le stime per $\rho(t)$

$$\hat{\rho}(t) = \frac{\hat{C}(t)}{\hat{C}(0)} \quad \text{e} \quad \hat{\hat{\rho}}(t) = \frac{\hat{\hat{C}}(t)}{\hat{\hat{C}}(0)}. \quad (2.50)$$

La stima “naturale”

$$\hat{\tau}_{int} \equiv \frac{1}{2} \sum_{t=-(n-1)}^{(n-1)} \hat{\rho}(t) \quad (2.51)$$

ha una varianza che non tende a zero quando la dimensione n del campione tende all’infinito. Questo perchè il segnale decresce esponenzialmente mentre il rumore si somma a dare una varianza di ordine 1 anche per n molto grandi.

Il metodo per stimare correttamente $\tau_{int,A}$ è quello di fermarsi nella somma quando il rumore è grande rispetto al segnale. Questo può essere fatto ad esempio introducendo un peso $\eta(t)$, che va a zero quando t è più grande di una certa finestra M

$$\eta(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } |t| \leq M, \\ 0 & \text{se } |t| > M, \end{cases} \quad (2.52)$$

e usando come stima

$$\hat{\tau}_{int,A} = \frac{1}{2} \sum_{t=-(n-1)}^{(n-1)} \eta(t) \hat{\rho}(t). \quad (2.53)$$

Questo cutoff introduce un errore sistematico

$$\text{bias}(\hat{\tau}_{int}) = -\frac{1}{2} \sum_{|t|>M} \rho(t) + o\left(\frac{1}{n}\right). \quad (2.54)$$

D’altro canto la varianza di $\hat{\tau}_{int}$ può essere calcolata ottenendo

$$\text{var}(\hat{\tau}_{int}) \approx \frac{2(2M+1)}{n} \tau_{int}^2 \quad (2.55)$$

dove si è approssimato $\tau \ll M \ll n$. La scelta di M è un compromesso fra aumento dell’errore sistematico o della varianza: il primo può essere reso piccolo prendendo M largo abbastanza cosicchè $\rho(t)$ è trascurabile per $|t| > M$, mentre la varianza è mantenuta piccola prendendo M non più grande del necessario. Un esempio di realizzazione è quello di Madras e Sokal [24] (metodo della finestra automatica): si sceglie per M il più piccolo intero tale che $M \geq c\tau_{int}(M)$, dove c va scelto a seconda del caso specifico (se $\rho(t)$ decade esponenzialmente $c \sim 10$ è più che adeguato). Questo metodo funziona abbastanza bene per correlazioni che decadono esponenzialmente. In alcuni casi però le correlazioni hanno una coda molto lunga, nascosta nella regione ad alto rumore, che non può essere trascurata senza sottostimare τ_{int} (ciò si manifesta anche col fatto che τ_{exp} e τ_{int} hanno

esponenti critici dinamici diversi fra loro). Bisogna allora trovare delle soluzioni “ad hoc” a seconda della particolare forma della coda come ad esempio quella proposta da Li *et al.* [11] per l’algoritmo *pivot*, dove si osserva un comportamento del tipo $\rho(t) \approx 1/t^q$ nella zona intermedia in cui $t < \tau_{exp}$, con $q \approx 1 - 1.2$. Questa soluzione consiste nell’estrapolare $\rho(t)$ proporzionalmente ad $1/t$ fuori dalla finestra (cioè $\hat{\rho}(t) = M\hat{\rho}(M)/t$ per $t > M$) e si interrompe la somma ad un tempo molto più grande di M , dell’ordine di τ_{exp} , ottenendo così la stima modificata

$$\tilde{\tau}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{t=-M}^{+M} \hat{\rho}(t) + M\hat{\rho}(M) \log \left(\frac{\tau_{exp}}{M} \right). \quad (2.56)$$

2.3 Algoritmi Dinamici per il SAW

Lo sviluppo di un algoritmo Monte Carlo, una volta deciso lo spazio degli stati e la distribuzione di equilibrio π desiderata, consiste nei seguenti quattro passi:

- specificare l’insieme di mosse elementari permesse (cioè le transizioni $\omega \rightarrow \omega'$ per le quali $p(\omega \rightarrow \omega') > 0$),
- specificare le probabilità $p(\omega \rightarrow \omega')$ per le mosse permesse
- provarne l’ergodicità
- provare la stazionarietà della distribuzione π rispetto a P .

Gli algoritmi dinamici per il SAW possono avere carattere locale, bilocale o globale a seconda del tipo di mosse utilizzato (menzioneremo solo il caso di mosse che conservano N):

1. *mosse locali*; modificano solo pochi siti consecutivi lasciando inalterata la configurazione di tutti gli altri siti del SAW. Più precisamente, siano ω e ω' due SAW’s di N passi, e sia k un intero ≥ 1 . Si dirà che ω e ω' sono interconvertibili con una mossa di k siti se $\exists i_{min}$ ($0 \leq i_{min} \leq N - k + 1$) tale che $\omega = \omega'$ per tutti gli i eccetto al più $i_{min}, i_{min} + 1, \dots, i_{min} + k - 1$ (assumendo $\omega_{i_{min}} \neq \omega'_{i_{min}}$ e $\omega_{i_{min}+k-1} \neq \omega'_{i_{min}+k-1}$ dato che altrimenti basterebbe muovere meno di k siti). Se $i_{min} = 0$ o $i_{min} = N - k + 1$ essa non conserverà gli estremi; negli altri casi la chiameremo mossa *interna* e chiaramente essa conserverà gli estremi. Fig. 2.1 e Fig 2.2 mostrano tutte le possibili mosse locali di un sito, interne e non, e tutte quelle interne di due siti, su un reticolo ipercubico.
2. *mosse bilocali*; alterano due piccoli gruppi disgiunti di siti (che possono essere anche molto distanti fra loro). Il modo banale di costruire una mossa bilocale è quello di mettere insieme due mosse locali che non si sovrappongano. Noi siamo però interessati alle mosse non banali, cioè quelle in cui una parte del cammino perde dei siti mentre l’altra li guadagna. Alcuni esempi sono:

- mossa “reptation” che cancella un link da un’estremità e ne attacca un altro all’estremità opposta (Fig. 2.3).

Figura 2.1: Mosse interne ed esterne di un sito. (A) One-bead flip. (B) Rotazione di 90° di un estremo. (C) rotazione di 180° gradi di un estremo.

Figura 2.2: Mosse interne di due siti. (D) rotazione di 180° di una kink. (E) rotazione di 90° di una kink (in $d \geq 3$). (F) Two-bead L-flip. (G) Permutazione cubica (in $d \geq 3$).

Figura 2.3: Mossa reptation. Il link tratteggiato indica il passo proposto (nella prima figura) e quello abbandonato (nella seconda).

Figura 2.4: Mossa kink-transport. Una kink viene tolta da AB e viene attaccata in CD.

Figura 2.5: Mossa kink-end reptation (\longrightarrow) e mossa end-kink reptation (\longleftarrow). In (\longrightarrow), una kink viene tolta da AB e due nuovi passi vengono attaccati all'estremità marcata con \times .

- mossa “kink-transport” che cancella due link di una configurazione ad U (anche chiamata “kink”) in un punto del cammino e ne inserisce altri due a formare una nuova U, con orientazione arbitraria, in un altro punto del cammino (Fig. 2.4).
 - mossa “kink-end reptation” che cancella una U in un punto del cammino e attacca due nuovi link ad una delle estremità (Fig. 2.5).
 - mossa “end-kink reptation” che cancella due link ad una estremità e inserisce una U (con orientazione arbitraria) in un altro punto del cammino (Fig. 2.5).
3. *mosse non locali*; muovono una parte considerevole del cammino e di conseguenza il nuovo cammino proposto viola molto spesso il vincolo di “self-avoidance”; è perciò molto difficile inventare mosse non locali la cui frazione di accettazione non vada a zero troppo rapidamente per $N \rightarrow \infty$. Secondariamente, una mossa non locale costa un tempo di CPU di ordine N in contrasto con ordine 1 delle mosse locali o bilocali. È quindi difficile trovare mosse efficaci (che riducano $\tau_{int,A}$ più di

Figura 2.6: Mossa pivot (qui una rotazione di 90°). Il “fulcro” è indicato con \times .

quanto non aumentino T_{CPU}). Solo due classi di mosse “utili” non locali sono note attualmente: mosse *pivot* e mosse *cut-and-paste*.

In una mossa pivot si sceglie un sito ω_k lungo il cammino come “fulcro” e si applica un’operazione di simmetria del cristallo alla parte di cammino successiva al “fulcro” usando questo punto come origine (vedi Fig. 2.6). Il cammino proposto è

$$\omega'_i = \begin{cases} \omega_i & \text{per } 0 \leq i \leq k \\ \omega_k + g(\omega_i - \omega_k) & \text{per } k+1 \leq i \leq N \end{cases} \quad (2.57)$$

dove g è l’operazione di simmetria.

In una mossa cut-and-paste, si divide il cammino in due o più pezzi, si opera un’inversione e/o una riflessione e/o una permutazione delle varie parti, ed infine si riassemblano assieme. Per esempio si può invertire una parte del cammino $\omega^{[k,l]}$ (vedi Fig. 2.7):

$$\omega'_i = \begin{cases} \omega_k + \omega_l - \omega_{k+l-i} & \text{per } k \leq i \leq l \\ \omega_i & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (2.58)$$

Più generalmente si può applicare a $\omega^{[k,l]}$ qualsiasi operazione di simmetria che lascia ω_k e ω_l invarianti, oppure che inverte ω_k e ω_l seguita da un’inversione. Questa operazione esiste se $\omega_l - \omega_k$ giace su un asse o su un iperpiano diagonale. Empiricamente si trova che le mosse pivot e cut-and-paste hanno ragionevoli probabilità di accettazione anche per N grandi, dell’ordine di $\sim N^p$ con p tipicamente dell’ordine di 0.1 - 0.4. La ragione euristica è che queste mosse conservano la maggior parte della struttura della catena (e quindi la sua self-avoidance), eccetto vicino al fulcro o vicino ai punti di taglio.

Veniamo ora ad una breve rassegna degli algoritmi esistenti per l’ensemble ad N fissato, x variabile che ci interesserà in seguito.

2.3.1 Algoritmi Locali

Storicamente i primi algoritmi Monte Carlo dinamici per il SAW furono gli algoritmi locali che coservavano N . Sfortunatamente, come venne dimostrato da Madras e Sokal

Figura 2.7: Mossa cut-and-paste. Inversione del sottocammino $\omega^{[k,l]}$.

Figura 2.8: Alcune configurazioni “doppio cul-de-sac”, congelate per algoritmi locali con mosse di al massimo due siti.

Figura 2.9: Una configurazione a “doppio cul-de-sac ripiegato”, disegnata per $a = 3$. Tale configurazioni sono congelate per algoritmi locali con mosse che spostano fino a k siti, con $k \leq a$.

nel 1987 [25], tutti gli algoritmi di questo tipo in $d = 2, 3$ sono *non ergodici* per N sufficientemente elevato¹. Inoltre essi provarono che per grandi N , ogni classe ergodica contiene solo *frazioni esponenzialmente piccole* dello spazio delle configurazioni del SAW. Questa nonergodicità è abbastanza facile da vedere: consideriamo le configurazioni *doppio cul-de-sac* mostrate in Fig. 2.8(a). Questo SAW è completamente “congelato” sotto mosse elementari A,B,D e F: non può trasformarsi in nessun altro stato e non può essere raggiunta da nessun altro. Di conseguenza algoritmi basati su queste mosse sono non ergodici (in $d = 2$) già per $N = 11$. Se la mossa C è permessa allora la configurazione di Fig. 2.8(a) non è più congelata, ma quella di Fig. 2.8(b) lo è ancora (in questo caso la nonergodicità appare in $d = 2$, per $N = 15$). Se sono permesse mosse di due siti che spostano un estremo allora la configurazione di Fig. 2.8(b) non è più congelata ma lo è ancora quella di Fig. 2.8(c). Quindi, ogni algoritmo basato su mosse di un sito o di due siti è non ergodico (in $d = 2$) per $N = 19$. Quando sono permesse mosse di tre siti nessuna delle configurazioni *doppio cul-de-sac* (non importa quanto alta sia) è più congelata. Basta però piegare il doppio cul-de-sac una volta in più, come in Fig. 2.9, per ottenere una configurazione congelata sotto mosse di k siti per k arbitrario. Questa è l’idea dietro la prova di Madras e Sokal. Un tipo di nonergodicità interamente differente si presenta in dimensione $d = 3$ (e solo qui) per la possibilità di *nodì*. La più semplice configurazione annodata è mostrata in Fig. 2.10(A): essa ha $N = 18$, e, sebbene non sia completamente congelata, non può essere deformata ad una barra dritta usando mosse del tipo A-F. È probabile che analoghi nodi possano essere costruiti per mosse di k siti con k arbitrario. Dato che gli algoritmi locali che conservano N sono non ergodici, i loro tempi di autocorrelazione τ_{exp} e $\tau_{int,A}$ sono per definizione $+\infty$: La simulazione non converge mai alle medie d’ensemble corrette. Non di meno, possiamo chiederci quale sia il tempo per esplorare adeguatamente una classe di ergodicità a cui appartiene la configurazione iniziale. Una stima rozza è la seguente:

Consideriamo l’evoluzione del baricentro $\bar{\omega}$ di una catena. Esso esegue sostanzialmente un cammino aleatorio, muovendosi ad ogni mossa elementare di una distanza $\Delta\bar{\omega}$ dell’ordine di $1/N$. Quando ha percorso un tratto $\sim \sqrt{\text{var}(\bar{\omega})} = \sqrt{\langle \bar{\omega}^2 \rangle} \sim N^\nu$, sembra ragionevole dire che la catena ha assunto una configurazione “essenzialmente nuova”. Il tempo impiegato è quindi di circa $\tau \sim \left(\frac{\sqrt{\text{var}(\bar{\omega})}}{\Delta\bar{\omega}} \right)^2 \sim N^{2\nu+2}$ in unità di mosse elementari. In ogni caso questo è un limite inferiore per τ_{int,R_g^2} e quindi anche per τ_{exp} ed il vero τ può essere significativamente più grande a causa dei modi a lento rilassamento (ad esempio dovuti a speciali leggi di conservazione che li inibiscono).

2.3.2 Algoritmi Bilocali

L’algoritmo *reptation*, basato sulle mosse omonime (vedi pagina 36), è anch’esso non ergodico. Configurazioni congelate sono quelle in cui entrambe le estremità sono intrappolate in culs-de-sac. La più semplice configurazione di questo tipo è mostrata (per $d = 2$) in Fig. 2.10(B), e ha $N = 14^2$. Come per gli algoritmi locali, possiamo chiederci come si

¹Per algoritmi basati sul movimento di k o meno siti, la nonergodicità è presente in $d = 2$ per tutti gli $N \geq 16k + 63$, ed anche per numerosi N più piccoli

²La somiglianza fra le configurazioni in Fig. 2.8, 2.9, 2.10(B) è comunque solo superficiale: la nonergodicità per i due tipi di algoritmi è di natura radicalmente diversa. Nel caso di algoritmi locali essa è dovuta a configurazioni congelate in tutti i punti del cammino, mentre per reptation la non-ergodicità

Figura 2.10: (A) Configurazione a “nodo”, che non può essere deformata ad una sbarra diritta per mezzo delle mosse A-F in Fig. 2.1, 2.2. (B) Configurazione a “doppio cul-de-sac” congelata per l’algoritmo reptation.

comportino tempi di autocorrelazione all’interno di una particolare classe ergodica. Un argomento euristico suggerisce $\tau \sim N^2$. Questo perchè il SAW si trasforma “strisciando” casualmente avanti e indietro lungo la catena; dopo $\sim N^2$ mosse questo scivolamento avrà compiuto N passi, e tutti i legami originali della catena saranno stati rimpiazzati casualmente da nuovi legami. La non ergodicità dell’algoritmo reptation può essere curata aggiungendo mosse bilocali e locali. Infatti, i seguenti algoritmi sono noti essere ergodici:

- reptation + kink-end e end-kink reptation [26]
- kink-end e end-kink reptation + rotazione di 90° di un estremo [27]

In questa tesi ci occuperemo di nuovi algoritmi basati su mosse locali e bilocali, dimostrandone rigorosamente l’ergodicità, e studiandone poi il comportamento critico dinamico per stabilire la classe di universalità cui appartengono e se l’argomento euristico che indica $\tau \sim N^2$ sia, in questo caso, esatto, approssimato o sbagliato. I nuovi algoritmi di cui verrà dimostrata l’ergodicità sono:

1. algoritmo *Bilocal* in $d = 2$; kink-transport (Fig. 2.4) + one-bead flip (mossa A in Fig. 2.1) + rotazione di 90° o 180° di un estremo (mosse B e C in Fig. 2.1)
2. algoritmo *Reptation modificato* in $d = 2$; kink-transport (Fig. 2.4) + one-bead flip (mossa A in Fig. 2.1) + reptation (Fig. 2.3)
3. algoritmo *Satyr* in $d \geq 2$; kink-end e end-kink reptation (Fig. 2.5)

2.3.3 Algoritmi Non Locali

Gli algoritmi basati su mosse cut-and-paste sono adatti allo studio dell’ensemble ad N fissato e x fissato. Rimane quindi l’algoritmo Pivot, importantissimo dato che è di gran

sopraggiunge solo quando entrambe le estremità sono intrappolate in “cul-de-sac”. Si può anche mostrare che la classe di ergodicità della barra diritta nell’algoritmo reptation contiene almeno una frazione $N^{-(\gamma-1)/2}$ dello spazio delle configurazioni del SAW, mentre per gli algoritmi locali essa contiene solo una frazione esponenzialmente piccola.

lunga il più efficiente algoritmo mai inventato per l'ensemble ad N fissato e x variabile. Descriviamolo brevemente.

Inizialmente viene scelto casualmente un “fulcro” ω_k , d'accordo con un insieme di probabilità strettamente positive p_1, \dots, p_{N-1} (necessario per l'ergodicità dell'algoritmo); si applica poi una mossa di tipo pivot (vedi pagina 39) scegliendo a caso con probabilità p_g l'elemento del gruppo di simmetria del reticolo cubico da utilizzare nella mossa. L'ergodicità è verificata se tutte le riflessioni rispetto agli assi, e tutte le rotazioni di π o tutte le riflessioni diagonali, hanno probabilità non nulla. Si può poi vedere che la condizione del bilancio dettagliato è verificata se $p_g = p_{g^{-1}}$.

La frazione di accettazione delle mosse proposte tende a zero per $N \rightarrow \infty$ come N^{-p} , dove empiricamente si trova che $p \approx 0.19$ in $d = 2$ e ≈ 0.11 in $d = 3$ [24]. Questo significa che le mosse proposte hanno successo solo una volta ogni N^p mosse. Ma le mosse pivot sono radicali e si può congetturare che una configurazione essenzialmente nuova sia raggiunta dopo poche mosse accettate. Questa congettura porta a predire per il tempo di autocorrelazione un andamento del tipo $\tau \sim N^p$ per osservabili globali mentre per osservabili locali, che cambiano solo quando il “fulcro” coincide con uno dei siti che li interessa, del tipo $\tau \sim N^{p+1}$. Nonostante il ragionamento sia un po' rozzo questa predizione appare essere vera. Un'attenta analisi della complessità computazionale dell'algoritmo mostra che, cominciando il controllo di self-avoidance dal “fulcro”, una mossa accettata può essere prodotta in un tempo di CPU di ordine N mentre un fallimento può essere riscontrato in un tempo medio dell'ordine di N^{1-p} per ognuno degli $\sim N^p$ fallimenti. Questo permette di concludere che una configurazione “effettivamente indipendente” può essere prodotta in un tempo di CPU dell'ordine di N (o forse di $N \log N$), cioè notevolmente meglio dell' $N^{2+2\nu}$ degli algoritmi locali o dell' $N^{\approx 2}$ degli algoritmi bilocali. Infatti questo ordine di efficienza non può essere sorpassato in quanto un tempo di ordine N è necessario semplicemente per *scrivere* un cammino di N passi.

Capitolo 3

Studio teorico di alcuni Algoritmi Bilocali

In questo capitolo ci interessiamo della simulazione di SAWs di lunghezza fissata, estremo libero ed interazione fra siti primi vicini non consecutivi, dall'ensemble con distribuzione di probabilità

$$\pi_\beta(\omega) = Z^{-1}(\beta)e^{\beta\mathcal{E}[\omega]} \quad (3.1)$$

dove $\mathcal{E}[\omega]$ è il numero di “legami energetici” fra il SAW e $\beta \geq 0$ (vedi pagina 21). L'algoritmo pivot è il più potente metodo di simulazione Monte Carlo nel caso $\beta = 0$. Nel caso interagente però, le mosse pivot, a causa del loro carattere non locale, causano variazioni troppo grandi nell'energia rendendo più difficile l'accettazione, da parte del test Metropolis, delle mosse proposte. Per questo motivo sono stati sviluppati nuovi algoritmi che utilizzino contemporaneamente mosse locali e bilocali, dove queste ultime sono necessarie per l'ergodicità, per aumentare la velocità di decorrelazione delle configurazioni generate in successione, e sono supposte utili per l'allontanamento dalle configurazioni a bassa energia del tipo mostrato in Fig 3.1 (le linee tratteggiate indicano i legami energetici fra primi vicini). Questo capitolo è diviso in due parti: nella prima viene data una prova rigorosa dell'ergodicità dei tre algoritmi bilocali citati a pagina 42. Nella seconda parte vengono studiati gli algoritmi dal punto di vista teorico, mostrando come la matrice di transizione venga determinata dalle caratteristiche specifiche dello stesso e dall'imposizione dell'equazione del bilancio dettagliato.

3.1 Dimostrazione dell'ergodicità in due dimensioni per l'algoritmo Bilocal

Consideriamo un reticolo ipercubico d -dimensionale e la regione G , che chiameremo una *striscia* di larghezza w , data dai punti del reticolo di coordinate (n_1, \dots, n_d) che soddisfano $0 \leq n_d \leq w$.

Consideriamo ora SAWs, contenuti in G , che partono da un punto $x_0 \in G$ e di lunghezza N . Si vede facilmente che l'algoritmo pivot non è ergodico su una striscia. Un semplice controesempio è il seguente: sia $d = 2$, $w = 2$ e consideriamo il cammino di passi $S^2E^2NWN E^6$ (N, S, E, W indicano rispettivamente Nord, Sud, Est e Ovest). È facile controllare che non esistono mosse pivot in grado di modificare la configurazione dei primi 9 passi.

Vogliamo ora dimostrare, in $d = 2$, l'ergodicità dell'algoritmo che consiste delle seguenti mosse:

- mossa kink-transport (vedi Fig. 2.4) che verrà nel seguito chiamata (22).
- mossa one-bead flip (vedi Fig. 2.1(A)) che verrà nel seguito chiamata (0).
- mossa end-bond rotation (vedi Fig. 2.1 (B),(C)) che verrà nel seguito chiamata (1)

Le prime due sono ottenute da quelle del BFACF (algoritmo utilizzato nell'ensemble ad N variabile e x fissato, inventato da Berg e Foerster [28] e da Araújo de Carvalho, Caracciolo e Fröhlich [29, 30]) che consiste dei seguenti tre tipi di mosse:

- mossa $\Delta N = -2$ che toglie una kink dal cammino
- mossa $\Delta N = +2$ che inserisce una kink nel cammino
- mossa (0) (one bead-flip) già vista qui sopra.

Combinando le mosse $\Delta N = -2$ e $\Delta N = +2$, in modo da mantenere N inalterato, si ottiene la mossa (22) (kink-transport) nella quale si toglie una kink da un punto del cammino inserendone una nuova in un altro punto, diverso dal precedente.

Questo risultato sembra essere falso in $d = 3$ (un probabile controesempio è la configurazione annodata in Fig 2.10), ma mostreremo nella prossima sezione che è possibile considerare un algoritmo *ibrido* che contiene anche mosse Satyr, ergodico in qualsiasi dimensione. Infatti mostreremo che le sole mosse Satyr, che in un certo senso includono mosse bilocali e mosse pivot sull'ultimo link, sono ergodiche in $d \geq 3$, mentre in due dimensioni non può essere evitato l'uso della mossa (0). Notiamo inoltre che la prova può essere estesa ad un cilindro, cioè al caso in cui consideriamo una striscia con condizioni periodiche, con il SAW che può “attraversare” i bordi della striscia.

Inizieremo con alcune definizioni:

Definizione 1: Un sottocammino $\omega[i, j]$, ($0 \leq i < j \leq N$) è un *curva a C* di ω se $j - i \geq 3$, $\omega[i+1, j-1]$ giace su una linea retta perpendicolare ai passi $\Delta\omega(i) \equiv (\omega_{i+1} - \omega_i)$ e $\Delta\omega(j-1)$ e $\Delta\omega(i) = -\Delta\omega(j-1)$.

La lunghezza della curva a C è la lunghezza del sottocammino.

Definizione 2: Dato un segmento s , diremo che s *contiene* una curva a C $\omega[i, j]$ se il segmento $\omega[i+1, j-1]$ appartiene ad s .

Definizione 3: Una curva a C di ω , $\omega[i, j]$ è *ostruita* se c'è un sito di ω che giace sul segmento di linea i cui estremi sono $\omega(i)$ e $\omega(j)$. Altrimenti è *non-ostruito*.

Nota 1: Se la curva a C $\omega[i, j]$ è ostruita, distingueremo tre differenti situazioni

1. uno degli estremi di ω appartiene al segmento i cui estremi sono $\omega(i)$ and $\omega(j)$;
2. il segmento i cui estremi sono $\omega(i)$ e $\omega(j)$ contiene almeno una curva a C;
3. $\omega(i-1)$ e/o $\omega(j+1)$ appartengono al segmento che connette $\omega(i)$ e $\omega(j)$.

Notiamo che questi casi non si escludono a vicenda. Possono infatti esistere situazioni in cui 1., 2. e 3. sono simultaneamente veri.

Definiamo ora l'*ombra* di una curva a C. Data una tale curva $\omega[i, j]$ scegliamo il sistema di coordinat in modo da avere $\omega(i) = (1, 0)$, $\omega(i+1) = (0, 0)$, $\omega(j-1) = (0, h)$ e $\omega(j) = (1, h)$ con $h = j - i - 2$. Si avrà

Definizione 4: l' *ombra* di una curva a C $\omega[i, j]$ è la regione del piano il cui contorno è dato dalla curva a C e dalle rette di equazione $y = x - 1$ e $y = -x + h + 1$.

Definizione 5: Il *rettangolo circoscritto* $R[\omega]$ del cammino ω è il rettangolo formato da punti del reticolo contenente ω e di area minima (che può essere zero).

Lemma 1: Dato un cammino ω , si consideri la curva a C $\omega[i, j]$ tale che ogni estremo di ω soddisfi una delle seguenti due condizioni:

1. l' estremo non è un punto interno all' ombra della curva a C (ma può appartenere al contorno);
2. l'estremo è punto interno all'ombra della curva a C e solo uno dei suoi primi vicini è un sito del cammino ω , cioè quello immediatamente precedente nel cammino.

Allora l'ombra di $\omega[i, j]$ contiene una curva a C non ostruita.

Dimostrazione: Consideriamo $\omega[i, j]$. Se essa è non-ostruita non c'è niente da dimostrare. Altrimenti si noti che solo i casi 2. e 3. della Nota 1 possono verificarsi dalle ipotesi. Se siamo nel caso 3. è sufficiente considerare $\omega[i - 1, i + 2]$ o $\omega[j - 2, j + 1]$. Una delle due è una curva a C non-ostruita di lunghezza 3 e quindi abbiamo finito. Nel caso 2. il segmento i cui estremi sono $\omega(i)$ e $\omega(j)$ contiene una curva a C $\omega[k, l]$ che ha almeno due passi in meno di $\omega[i, j]$. In più l'ombra di $\omega[k, l]$ è contenuta nell'ombra di $\omega[i, j]$ così che la condizione riguardante gli estremi si applica anche a $\omega[k, l]$. Si può applicare lo stesso argomento dato per $\omega[i, j]$ e procedere per induzione sulla lunghezza del cammino. La dimostrazione è così completata dato che ogni curva di lunghezza 3 è ovviamente non-ostruita. Q.E.D.

Lemma 2: Dato un cammino ω con $N \geq 3$ e per il quale gli estremi sono primi vicini, esisterà una curva a C $\omega[i, j]$ tale che:

- a. $\omega[i, j]$ è non-ostruita;
- b. il segmento che congiunge $\omega(i)$ e $\omega(j)$ appartiene al dominio chiuso $D[\omega]$ il cui contorno è il poligono formato dal cammino e dal segmento che connette gli estremi.

Dimostrazione: Prima di tutto notiamo che il lemma è vero quando $N = 3$. Consideriamo ora un cammino di lunghezza $N > 3$. Questo cammino contiene certamente una curva a C $\omega[i, j]$ che soddisfa la proprietà b. (è sufficiente considerare una curva a C che giace sul contorno del rettangolo circoscritto). Se essa è non-ostruita abbiamo concluso. Altrimenti c'è un punto $\omega(k)$, $k < i$ o $k > j$, che appartiene al segmento che congiunge $\omega(i)$ e $\omega(j)$, che è primo vicino di $\omega(h)$ con $i + 1 < h < j - 1$. Non è restrittivo supporre $k < h$ e considerare il sottocammino $\omega[k, h]$. La lunghezza di tale sottocammino è strettamente minore della lunghezza di ω dato che $h < j - 1 \leq N - 1$, ma è maggiore o uguale a 3 in quanto $k < i$ e $h > i + 1$. Inoltre, dato che $\omega[i, j]$ soddisfa b., $D[\omega]$ contiene $D[\omega[k, h]]$.

Allora, ogni curva a C che soddisfa le condizioni a. e b. per il sottocammino $\omega[k, h]$, soddisferà le analoghe condizioni per il cammino completo ω . La dimostrazione procede per induzione sulla lunghezza del cammino. Q.E.D.

Nota 2: Questo lemma prova l'ergodicità dell'algoritmo BFACF per i poligoni. In fatti, usando mosse (0) si può ridurre una curva a C non-ostruita ad una di lunghezza minima, cioè tre, e poi tagliarla con una mossa $\Delta N = -2$. Ripetendo tale procedimento, ogni poligono può essere ridotto ad un quadrato.

Lemma 3: Dato un cammino con estremi $\omega(0) = (0, 0)$, $\omega(N) = (n, 0)$, $n \geq 1$, tale che nessun punto del cammino giaccia sul segmento congiungente $\omega(0)$ e $\omega(N)$, esiste una curva a C tale che:

- a. $\omega[i, j]$ is non-ostruita;
- b. il segmento congiungente $\omega(i)$ e $\omega(j)$ appartiene al dominio chiuso $D[\omega]$ il cui contorno è formato dal cammino e dal segmento che ne connette gli estremi.

Dimostrazione: Considerando il rettangolo circoscritto, possiamo di nuovo trovare una curva a C che soddisfi b. Se essa è non-ostruita abbiamo concluso. Altrimenti ripetiamo l'argomento del lemma precedente. Q.E.D.

Teorema 1: Dato un cammino arbitrario ω che abbia almeno una curva a C, allora ω ha una curva a C non-ostruita.

Dimostrazione: Consideriamo la curva a C e la sua ombra. Se la condizione 1. o la 2. del lemma 1 è soddisfatta abbiamo finito. Altrimenti possiamo supporre, senza perdita di generalità, che $\omega(0)$ e $\omega(k)$, $k \neq 1$ siano primi vicini. Consideriamo allora il cammino $\omega_1 = \omega[0, k]$ e $D[\omega_1]$, il dominio chiuso il cui contorno è ω_1 ed il segmento che collega $\omega(0)$ con $\omega(k)$.

Supponiamo inizialmente che $\omega(N) \notin D[\omega_1]$. In questo caso $\omega(i) \notin D[\omega_1]$ per tutti gli $i > k$. Appliciamo poi il lemma 2 ad ω_1 che garantisce l'esistenza di una curva a C $\omega[i, j]$ tale che il segmento congiungente $\omega(i)$ con $\omega(j)$ appartenga a $D[\omega_1]$ e che nessun punto di ω_1 giaccia su questo segmento. Ma, dato che $\omega(i) \notin D[\omega_1]$ per tutti gli $i > k$, otteniamo che nessun punto di ω giace sul segmento che unisce $\omega(i)$ e $\omega(j)$. Quindi $\omega[i, j]$ è non-ostruita.

Supponiamo ora che $k = N$. In questo caso è sufficiente considerare il lemma 2 per concludere la dimostrazione.

Supponiamo infine che $\omega(N) \in D[\omega_1]$, $k \neq N$, così che l'estremo sia strettamente contenuto in $D[\omega_1]$. È immediato vedere che anche $\omega(i)$, $i > k$ sono strettamente contenuti in $D[\omega_1]$. Sia j tale che il segmento congiungente $\omega(j)$ e $\omega(N)$ sia una linea orizzontale che non contiene alcun altro punto del cammino. È evidente che $D[\omega[j, N]]$ è strettamente contenuto in $D[\omega_1]$. Quindi nessuno dei punti $\omega(i)$, $0 \leq i < j$ appartiene a $D[\omega[j, N]]$. Possiamo applicare il lemma 3 per trovare una curva a C non-ostruita. Q.E.D.

Nota 3: Il teorema 1 prova l'ergodicità per l'algoritmo BFACF. Infatti, utilizzando mosse (0) si può ridurre le curve a C non-ostruite a curve di lunghezza minima., cioè tre, tagliandole poi con una mossa $\Delta N = -2$. Ripetendo questa procedura, ogni cammino ad estremi fissi può essere ridotto ad un cammino della forma $E^k N^p$ (in un opportuno sistema di riferimento).

Definizione 6: Il *dominio convesso* $C[\omega]$ del cammino ω è la regione del piano tale che $P \in C[\omega]$ se e solo se esistono due punti distinti P_1 e P_2 appartenenti ad ω (uno di essi può essere P stesso se $P \in \omega$) con $x_{P_1} = x_{P_2} = x_P$ e $y_{P_1} \leq y_P \leq y_{P_2}$ o con $y_{P_1} = y_{P_2} = y_P$ and $x_{P_1} \leq x_P \leq x_{P_2}$, dove x_Q e y_Q sono le coordinate di un punto Q . È banale vedere che $C[\omega]$ è contenuta in $R[\omega]$.

Consideriamo l'insieme dei punti interni di $C[\omega]$ che chiameremo A_1 .

Definizione 7: Diremo che ω è *banale* se $A_1 = \emptyset$.

Lemma 4: Consideriamo un cammino ω . ω non contiene alcuna curva a C se e solo se ω è banale.

Dimostrazione: Si supponga che ω non abbia nessuna curva a C. Consideriamo il primo passo scegliendo il sistema di coordinate in modo che $\Delta\omega(0)$ sia nella direzione \hat{x} positiva. Consideriamo inoltre il primo j_1 tale che $\Delta\omega(j_1)$ sia ortogonale all'asse x (se non esiste allora il cammino è una barra dritta, e quindi ovviamente banale). Scegliamo l'asse y così che $\Delta\omega(j_1)$ sia nella direzione \hat{y} positiva e cerchiamo il primo $j_2 > j_1$ tale che $\Delta\omega(j_2)$ sia ortogonale all'asse y . È chiaro che $\Delta\omega(j_2)$ non può essere nella direzione \hat{x} negativa perchè altrimenti $\omega[j_1 - 1, j_2 + 1]$ sarebbe una curva a C. Quindi tutti i passi sono nella direzione \hat{x} positiva o in quella \hat{y} positiva. Se $\omega(i) = (x_i, y_i)$ e $\omega(j) = (x_j, y_j)$, con $i < j$, abbiamo che $x_i \leq x_j$ e $y_i \leq y_j$ implicando che ω è banale.

Inversamente, supponiamo che ω contenga una curva a C $\omega[i, j]$. Di conseguenza tutti i punti appartenenti alla regione limitata da $\omega[i, j]$ e dal segmento che congiunge $\omega(i)$ e $\omega(j)$ appartengono al dominio convesso e quindi ω è non banale. Q.E.D.

Lemma 5: Consideriamo un cammino ω e supponiamo che la distanza tra $\omega(0)$ ed almeno un bordo della striscia sia al minimo 2. Se ω è banale, allora può essere ridotto ad una data sbarra.

Dimostrazione : Seguendo la dimostrazione del lemma precedente, introduciamo coordinate tali che: la striscia sia parallela all'asse x ; $\omega(0) = (x_0, y_0)$ e $\omega(N) = (x_N, y_N)$ con $x_0 \leq x_N$ e $y_0 \leq y_N$. Se indichiamo con N la direzione \hat{y} positiva, con S la direzione \hat{y} negativa, con E la direzione \hat{x} positiva e con W la direzione \hat{x} negativa, tutti i links di ω sono orientati ad E o a N .

Mostreremo che tali cammini possono essere ridotti alla sbarra E^N o a quella W^N . Mostriamo per prima cosa che le due possono essere deformate una nell'altra. Infatti

$$E^N \rightarrow E^{N-1}N \rightarrow NE^{N-1} \rightarrow NE^{N-2}N \rightarrow N^2E^{N-2} \quad (3.2)$$

dove abbiamo supposto senza perdita di generalità, che la distanza fra $\omega(0)$ e il bordo superiore della striscia è di almeno 2. Eseguendo ripetutamente la sequenza che segue

$$W^k N^2 E^p \rightarrow W^k N^2 E^{p-1} S \rightarrow W^k N^2 E S E^{p-2} \rightarrow W^{k+1} N E^p \rightarrow \quad (3.3)$$

$$W^{k+1} N E^{p-1} N \rightarrow W^{k+1} N^2 E^{p-1} \quad (3.4)$$

se $N \geq 3$ si può ridurre il cammino alla forma $W^k N^2 E$. I casi $N = 1$ o $N = 2$ sono banali e possono essere trattati separatamente. Allora

$$W^k N^2 E \rightarrow W^k N^2 W \rightarrow W^{k+1} N^2 \rightarrow W^{k+3} \quad (3.5)$$

Ora, utilizzando mosse (0) possiamo modificare il cammino a $\omega = N^k E^p$. Se $k > 0$,

$$\omega \rightarrow N^{k-1} E N E^{p-1} \rightarrow N^{k-1} E^p N \rightarrow N^{k-1} E^{p+1} \quad (3.6)$$

Quindi tutti i cammini sono ridotti a E^N . Q.E.D.

Definizione 8: Una *torre* di links di altezza $h \geq 0$ è un sottocammino $\omega[i, j]$ con $j - i = 2h + 1$, $0 \leq i < j \leq N$, tale che $\omega[i, i+h]$ e $\omega[i+1+h, j]$ siano segmenti e $\omega(i)$ e $\omega(j)$ siano primi vicini.

Chiamiamo il link l che connette $\omega(i)$ e $\omega(j)$ la *base* della torre. Denotiamo la torre come $T(l, h)$.

Inoltre diremo che la torre è parallela ad una data linea se i segmenti $\omega[i, i+h]$ e $\omega[i+1+h, j]$ sono paralleli a questa linea.

Definizione 9: Dato un cammino ω e una torre $T(l, h)$ definiamo il *cammino quoziente* $\omega/T(l, h)$ come il cammino di siti $\omega(0) \dots \omega(i), \omega(j) \dots \omega(N)$.

Definizione 10: Dato un cammino ω con una torre $T(l, h)$, sia $\bar{\omega} = \omega/T(l, h)$ il cammino quoziente. Se $\bar{\omega}$ è banale, ω è detto *cammino di Rattazzi*.

Lemma 6: Consideriamo un cammino ω . Si supponga che: 1. siamo nelle ipotesi del lemma 5, cioè la distanza tra $\omega(0)$ ed almeno uno dei due bordi della striscia sia al minimo 2; 2. che $\omega(0)$ non sia primo vicino del bordo più vicino della striscia. Se 1. e 2. sono verificate, allora se ω è un cammino di Rattazzi esso può essere ridotto ad una data sbarra.

Dimostrazione : Consideriamo $\bar{\omega} = \omega/T(l, h)$. Seguendo la dimostrazione del lemma 4 si introduca un sistema di coordinate tali che: la striscia sia parallela all'asse x ; $\omega(0) = (x_0, y_0)$ e $\omega(N) = (x_N, y_N)$ con $x_0 \leq x_N$ e $y_0 \leq y_N$. Se usiamo per N, S, E, W la stessa convenzione del lemma 5, tutti i links di $\bar{\omega}$ sono orientati a E o a N .

Mostriamo che tutti tali cammini possono essere ridotti alla sbarra E^N o a quella W^N . Nel lemma 5 abbiamo mostrato che queste due barre possono essere deformate una nell'altra. Se l'altezza della torre è zero ci riduciamo appunto al lemma 5; supponiamo quindi che l'altezza sia maggiore di zero. Distinguiamo due casi:

1. $\Delta\bar{\omega}(0)$ punta a N .
2. $\Delta\bar{\omega}(0)$ punta a E .

Discutiamo il primo caso. Mostriamo che è possibile muovere la torre così che la base sia il primo link e che tutti i punti appartenenti alla torre abbiano coordinate (x, y) con $x \leq x_0$. Questo può essere fatto muovendo sistematicamente le kinks eccetto che in due casi: a) quando la base è $\Delta\bar{\omega}(1)$, questo passo punta a N e la torre è sul lato W di $\bar{\omega}$; b) quando la base è $\Delta\bar{\omega}(0)$ ma tutti i punti appartenenti alla torre hanno coordinate (x, y) con $x \geq x_0$. Nel caso a) la configurazione del sottocammino $\omega[0, 2h+2]$ è $NW^h NE^h$. Allora con mosse (0) otteniamo

$$NW^h NE^h \rightarrow W^h N^2 E^h \rightarrow W^h NE^h N \quad (3.7)$$

muovendo così la torre sul primo link. Nel caso b), se la lunghezza di $\bar{\omega}$ è maggiore di 1, $\Delta\bar{\omega}(1)$ deve puntare a N . Quindi con mosse (22) possiamo riportarci al caso a). L'ultimo

caso da considerare è quello in cui $\bar{\omega}$ ha lunghezza 1. In questo caso il cammino ha la forma $\omega = E^h NW^h$. Ma

$$E^h NW^h \rightarrow E^h NW^{h-1} N \rightarrow E^{h-1} NW^{h-1} NE \quad (3.8)$$

che ha la forma studiata nel caso b), quando la lunghezza di $\bar{\omega}$ è maggiore di 1. Quest'ultimo passo non è possibile se $\omega(0)$ è primo vicino del bordo superiore della striscia perchè in questo caso non c'è abbastanza spazio tra $\omega(0)$ ed il bordo della striscia per ruotare la coda del cammino. Questa possibilità viene esclusa dall'ipotesi 2., sebbene si possa comunque srotolare il cammino passando al di sotto di $\omega(0)$ dato che dall'ipotesi 1. la distanza tra $\omega(0)$ ed il bordo inferiore della striscia è almeno 2. Si potrebbe essere tentati dal non richiedere l'ipotesi 2. riducendosi così alle ipotesi più deboli del lemma 5. È comunque inutile questa alternativa, dato che più avanti si incontrerà una situazione nella quale l'ipotesi più forte 2. su $\omega(0)$ è necessaria per l'ergodicità.

Allora, con mosse (0) possiamo ridurre ω in maniera tale che $\bar{\omega} = N^p E^w$. Se $p > 1$ modifichiamo ω affinché

$$\bar{\omega} \rightarrow N^{p-1} E N E^{w-1} \rightarrow N^{p-1} E^w N \rightarrow N^{p-1} E^{w+1} \quad (3.9)$$

Ripetendo la procedura si ottiene infine $\omega = W^h N E^{N-h-1}$. Se $N - h - 1 = 1$ si ha

$$\omega = W^h N E \rightarrow W^h N W \rightarrow W^{h+1} N \rightarrow W^{h+2} \quad (3.10)$$

Altrimenti se $N - h - 2 \geq 1$, e se $\omega(0)$ non è un primo vicino del bordo superiore della striscia, attraverso le seguenti trasformazioni

$$\omega \rightarrow W^h N E^{N-h-2} N \rightarrow W^h N^2 E^{N-h-2} \quad (3.11)$$

possiamo ridurre facilmente il cammino alla forma $W^h N^2 E^p$, cioè alla situazione studiata nel lemma 5. Quindi, in questo primo caso abbiamo provato che il cammino può essere ridotto alla sbarra W^N .

Prima di procedere, discutiamo un po' più approfonditamente il ruolo dell'ipotesi 2. e supponiamo che $\omega(0)$ sia primo vicino del bordo superiore della striscia. Questo impedisce, in generale, l'ultimo passo della costruzione precedente. Comunque sia $N - h - 1 = h + k$, dove $k = N_{\bar{\omega}} - 1$. Se $k = 0$, si può srotolare il cammino passando al di sotto di $\omega(0)$ perchè, grazie all'ipotesi 1., la distanza tra $\omega(0)$ ed il bordo inferiore della striscia è di almeno 2. Se $k \geq 2$, usando mosse (22) si può spostare la torre sul lato E di $\omega(0)$, ricostruendola sulla coda del cammino, e srotolarla, di nuovo passando sotto $\omega(0)$. Il punto cruciale si ha per $k = 1$: in questo caso se $\omega(0)$ è primo vicino del bordo della striscia, l'estremo $\omega(N)$ è "congelato" (vedi Nota 5 qui sotto).

Consideriamo ora il caso 2. dove $\Delta\bar{\omega}(0)$ punta ad E . Distingueremo i seguenti casi differenti:

Caso 2.a. La base della torre è $\Delta\bar{\omega}(0)$.

Allora il cammino ha la forma

$$\omega = N^h E S^h E^k N^l \dots \quad (3.12)$$

dove k e l possono essere 0, mentre $h \geq 1$. Quindi, muovendo delle kinks otteniamo un nuovo cammino

$$\omega = W^{h-1} N E^h S E^k N^l \dots \quad (3.13)$$

Se $k = l = 0$ si riduce ω alla forma $W^{h-1}NE^{h+1}$. Se $l = 0$ ma $k \neq 0$

$$\omega \rightarrow W^{h-1}NE^{h+1}SE^k \rightarrow W^{h-1}NE^{h+1+k}S \rightarrow W^{h-1}NE^{h+2+k} \quad (3.14)$$

Se $l \neq 0$, allora $k \neq 0$. Quindi

$$\omega \rightarrow W^{h-1}NE^hSENE^{k-1}N^{l-1} \dots \rightarrow W^hNE^{h+k+1}N^{l-1} \dots \quad (3.15)$$

In questo caso possiamo ridurre il cammino alla struttura studiata nel caso 1. concludendo la dimostrazione.

Caso 2.b. La base della torre è $\Delta\bar{\omega}(1)$ che punta ad E .

In questo caso il cammino ha la forma $\omega = EN^hES^hE^kN^l \dots$. Allora

$$\omega \rightarrow N^hE^2S^hE^kN^l \dots \rightarrow N^hES^hE^{k+1}N^l \dots \quad (3.16)$$

così che si torna al caso 2.a

Caso 2.c. La base della torre è $\Delta\bar{\omega}(k)$, $k > 1$ e in più tutti i $\Delta\bar{\omega}(j)$, $j \leq k$, puntano ad E .

In questo caso si usano le mosse (22) per spostare la torre sul primo link ritornando al caso 2.a.

Caso 2.d. La base della torre è $\Delta\bar{\omega}(k)$, il primo passo di $\bar{\omega}$ punta a N , $k > 0$.

In questo caso la torre deve giacere sul lato E di $\bar{\omega}$ e $\omega = E^{k+h}NW^hN^l \dots$. Se $l \geq 1$ allora si ha

$$\omega \rightarrow E^{k+h-1}NW^hNEN^{l-1} \dots \rightarrow NW^hNE^{k+h}N^{l-1} \dots \quad (3.17)$$

e di nuovo possiamo ridurre il cammino alla struttura studiata al caso 1. concludendo così la dimostrazione. Se $l = 0$ allora $\omega = E^{k+h}NW^h$, e se $\omega(0)$ non è un primo vicino del bordo superiore della striscia, possiamo facilmente riportare il cammino alla barra E^N usando le tecniche precedenti.

Caso 2.e. La base della torre è $\Delta\bar{\omega}(k+1)$, dove $\Delta\bar{\omega}(k)$ è il primo passo in direzione N . Inoltre la torre è parallela alla striscia e giace sul lato W di $\bar{\omega}$.

In questo caso, si muove la torre su $\Delta\omega(k)$ così che giaccia sul lato E del cammino, ritornando al caso 2.d.

Caso 2.f. Altrimenti.

In questo caso $\omega = E^kN \dots$. Non c'è quindi nessun ostacolo che impedisce di modificare il cammino affinché $\omega \rightarrow NE^k \dots$, ritornando così al caso 1.

Q.E.D.

Nota 4: Nelle ipotesi del lemma si ammette il caso in cui $\omega(0)$ giace sul bordo più vicino della striscia. In questa evenienza, per soddisfare la condizione 1., la striscia ha larghezza $w \geq 2$, altrimenti $w \geq 4$. Il caso in cui $\omega(0)$ giace su un bordo della striscia e w è grande abbastanza, è particolarmente interessante, dato che è il caso di un cammino in presenza di una superficie, che può eventualmente assorbirlo.

Nota 5: La condizione 2. che $\omega(0)$ non sia primo vicino del bordo, è necessaria per l'ergodicità. Si consideri infatti il caso in cui $\omega(0) = (0, 1)$, il bordo abbia equazione $y = 0$ e gli ultimi due link del cammino siano dati da $(-1, 0) \rightarrow (0, 0)$ e $(0, 0) \rightarrow (1, 0)$. È facile vedere che questo cammino non può essere deformato ad una barra perchè l'estremo $\omega(N) = (1, 0)$ è congelato.

Lemma 7: Date due curve a C $\omega[p, q], \omega[r, s]$ non coincidenti e tali che la lunghezza di $\omega[p, q]$ sia maggiore od uguale a 4, esiste un link appartenente a $\omega[p + 1, q - 1]$ che non appartiene a $\omega[r, s]$.

Dimostrazione : Ovvio. Q.E.D.

Teorema 2: Nelle stesse ipotesi 1. e 2. del lemma 6, l'algoritmo Bilocal è ergodico in $d = 2$.

Dimostrazione: proveremo che tutti i cammini possono essere trasformati in una barra data. L'idea della dimostrazione può essere riassunta come segue. Usando mosse (0) si riduce sistematicamente ogni curva a C non-ostruita ad una curva a C di lunghezza minima, cioè una kink, e tutte queste possono essere accumulate in una singola torre piazzata da qualche parte nel cammino, utilizzando mosse (22). Il punto cruciale della dimostrazione sarà mostrare che con questa procedura ogni cammino può essere ridotto ad un cammino di Rattazzi, cioè banale a parte una torre, e così ad una data barra grazie al lemma 6.

Introduciamo, per iniziare, la notazione utilizzata. Ad ogni cammino ω (che non sia una sbarra) con torre $T(l, h)$ si associa una tripletta $(\omega, T(l, h), t)$. Per definire t poniamo $\bar{\omega} = \omega/T(l, h)$ e consideriamo $R[\bar{\omega}]$. Definiamo R_1 e R_2 come i due lati di $R[\bar{\omega}]$ che sono perpendicolari al bordo della striscia. Introduciamo coordinate tali che l'asse x si diretto lungo la striscia. Se R_1 e R_2 hanno equazioni $x = x_1$ e $x = x_2$ rispettivamente, e (x_0, y_0) , (x_N, y_N) sono le coordinate di $\omega(0)$ e $\omega(N)$ rispettivamente, non è restrittivo assumere $|x_1 - x_N| \leq |x_1 - x_0|$ e $x_1 \leq x_2$. Se $|x_1 - x_N| \neq 0$ poniamo $t = 0$. Altrimenti si trovi il più piccolo \bar{x} tale che la linea $x = \bar{x}$ contenga un passo di $\bar{\omega}$ o il punto di inizio $\omega(0)$ (tale linea esiste sempre: nel caso peggiore il cammino è una linea parallela alla striscia e $\bar{x} = x_2 = x_0$). Poniamo poi $t = \bar{x} - x_1$.

La dimostrazione è per induzione. Il passo induttivo è il seguente: dato $(\omega, T(l, h), t)$ tale che $\bar{\omega}$ non sia banale, la torre sia parallela alla striscia e tutti i punti di $T(l, h)$ giacciono sul lato W rispetto alla base, e $\omega(0)$ non appartenga alla linea $x = x_1 + t$, allora esiste una sequenza di mosse tali che: a. il nuovo cammino ha di nuovo una torre parallela alla striscia, che giace sul lato W rispetto alla base; b. t cresce o rimane costante ma h (l'altezza della torre) aumenta.

Per iniziare l'induzione è sufficiente assumere $h = 0$ e scegliere l come un arbitrario passo perpendicolare al bordo della striscia. Alla fine del processo di induzione otterremo un nuovo cammino, che continueremo a chiamare ω , tale che $\bar{\omega}$ è banale oppure $\omega(0)$ appartiene alla retta $x = x_1 + t$. Nel primo caso ω è un cammino di Rattazzi, e grazie al lemma 6 può essere trasformato in una data sbarra, completando la dimostrazione. Il secondo caso sarà discusso alla fine.

Dimostriamo ora il passo di induzione. Supponiamo per prima cosa che $x = x_1 + t$ contenga una curva a C $\bar{\omega}[k, m]$. Allora, se la base della torre non appartiene a $\bar{\omega}[k + 1, m - 1]$, si usano le mosse (22) per spostare la torre così che la base diventi $\Delta\bar{\omega}(a)$ è la torre giaccia sul lato W rispetto alla base. È facile vedere che, grazie alla definizione di t questo è sempre possibile. Se $\bar{\omega}[k, m]$ è non-ostruito, allora applicando mosse (0) è possibile modificare $\bar{\omega}[k, m]$ in modo tale che il sottocammino di ω che connette $\bar{\omega}(a - 1)$ a $\bar{\omega}(a + 2)$ sia una torre diretta a W di altezza $h + 1$. In questo modo t incrementa di 1 o rimane costante mentre h cresce di un unità.

Altrimenti, dato che $\bar{\omega}$ è non banale, esisterà una curva a C non-ostruita $\bar{\omega}[i, j]$ (vedi

Teorema 1). Se la base della torre non appartiene a $\bar{\omega}[i, j]$, si riduca la curva a C e la si tagli, incrementando di 1 l'altezza della torre. Se essa contiene la base della torre, si noti che $\bar{\omega}[k, m]$ deve avere lunghezza maggiore od uguale a 4 dato che è ostruita e che, a causa del lemma 7, esisterà un link appartenente a $\{x = x_1 + t\} \cap \bar{\omega}[k, m]$ che non appartiene a $\bar{\omega}[i, j]$. Allora si muova la torre su questo link (ciò può essere fatto semplicemente con mosse (22) se questo link non è adiacente alla base della torre, o con mosse (0) se questo non è il caso) e a questo punto si riduca $\bar{\omega}[i, j]$, la si tagli e si incrementi l'altezza della torre di un unità. In entrambi i casi, grazie alla definizione di t , la torre può sempre crescere nella direzione W . In questo modo t rimane costante, ma h cresce di un unità.

Supponiamo adesso che la linea $x = x_1 + t$ non contenga curve a C . Dato che, per ipotesi, essa non può contenere $\omega(0)$ potrà allora contenere solo un sottocammino $\bar{\omega}[i, j]$ tale che $\bar{\omega}[j, N - 2h]$ sia una linea perpendicolare a R_1 che giace sul lato destro rispetto a $x = x_1 + t$. Con una scelta appropriata dell'asse y si ha $\bar{\omega}[i, N - 2h] = N^{j-i}W^{N-2h-j}$. Se $\bar{\omega}[i, N - 2h]$ non contiene la base della torre, utilizzando mosse (0) e mosse sull'estremo possiamo facilmente deformare ω affinché $\bar{\omega}[i, N - 2h]$ giaccia su una linea perpendicolare a R_1 . Questo è sempre possibile grazie alla definizione di t . In questo modo t incrementa di $j - i$.

Supponiamo che $\bar{\omega}[i, N - 2h]$ contenga la base della torre. Se $h = 0$ possiamo ripetere l'argomento precedente per deformare ω così che $\bar{\omega}[i, N - 2h]$ giaccia su una linea perpendicolare a R_1 . Se ω è ora una barra, abbiamo concluso. Altrimenti sia di nuovo $h = 0$ e si definisca come l un passo arbitrario parallelo a R_1 . Anche in questo caso t aumenta.

Ora supponiamo $h > 0$. Dato che, per ipotesi, $\bar{\omega}$ è non banale, esisterà una curva a C non ostruita $\bar{\omega}[k, m]$ (vedi Teorema 1). Se la base della torre non appartiene a $\bar{\omega}[k, m]$, si potrà ridurre, tagliare, aggiungendo una kink alla torre. Notiamo che la torre ha necessariamente la sua base su $\bar{\omega}[i, j]$, e quindi può crescere nella direzione W , grazie alla definizione di t . In questo modo t rimane costante, mentre h cresce. Si noti che $\bar{\omega}[k, m]$ può contenere la base della torre solo se $i = m - 1$ e se la base della torre è il link che congiunge $\bar{\omega}(i) = \bar{\omega}(m - 1)$ e $\bar{\omega}(i + 1) = \bar{\omega}(m)$. Se $\bar{\omega}[i, j]$ ha lunghezza di almeno 3, è facile muovere la torre in un link che non appartiene a $\bar{\omega}[k, m]$, così di nuovo può essere ridotta, tagliata, andando ad aumentare l'altezza della torre di un unità. Anche in questo caso t rimane costante mentre h cresce.

I due casi rimanenti sono quelli in cui $\bar{\omega}[i, j]$ ha lunghezza 2 o 1. Nel primo, cioè $j - i = 2$, con la stessa scelta dell'asse delle y di prima, si ha $\omega[i, N] = W^hNE^hNW^{N-2h-j}$. Con mosse (22) esso si riduce a $\omega[i, N] = W^{N-h-j}NE^hN$, e successivamente a $W^{N-h-j}N^2E^h$. Questa struttura è già stata studiata nel lemma 5 e 6, e può essere ricondotta a una sbarra W^{N-j+2} . Si arriva quindi a $\omega[i, N]$ giacente su di una retta perpendicolare a R_1 , h ridotto a 0, e t cresciuto di almeno $2h + 2$. Nel secondo caso, cioè $j - i = 1$, è $\bar{\omega}(j) = \bar{\omega}(N - 2h) = \omega(N)$, e si ha $\omega[i, N] = W^hNE^h$. Di nuovo questa struttura è già stata studiata nel lemma 5 e 6, e con qualche cautela si può ridurre il sottocammino alla sbarra $\omega[i, N] = W^{2h+1}$. In questo modo h si riduce a 0, ma t cresce di almeno $2h + 1$.

Qualche parola di cautela è necessaria, dato che è possibile che non ci sia abbastanza spazio per applicare la tecnica del lemma 5. Infatti proviamo ad effettuare la seguenti trasformazioni

$$\omega[i, N] = W^hNE^h \rightarrow W^hNE^{h-1}N \rightarrow W^hN^2E^{h-1} \rightarrow W^hN^2E^{h-1} \rightarrow \quad (3.18)$$

$$W^hN^2E^{h-2}S \rightarrow W^hN^2ESE^{h-3} \rightarrow W^{h+1}NE^{h-1} \rightarrow \dots \rightarrow \quad (3.19)$$

$$W^{2h-1}NE \rightarrow W^{2h-1}NW \rightarrow W^{2h}N \rightarrow W^{2h+1} \quad (3.20)$$

Esse possono essere impedito dal bordo se $\varpi(i)$ è primo vicino del bordo superiore della striscia. Si osservi allora che il bordo inferiore giace sotto $\varpi(i)$ ad una distanza di almeno un' unità, dato che per ipotesi $w \geq 2$. Inoltre la retta $x = x_1 + t$ non contiene nessun altro punto di ϖ eccetto $\varpi(i)$ e $\varpi(j)$, perchè se non fosse così dovrebbe contenere una curva a C, ritornando così ad un caso già considerato. In definitiva c'è abbastanza spazio sotto $\varpi(i)$ per effettuare le seguenti trasformazioni:

se $h = 1$ allora

$$\omega[i, N] = WNE \rightarrow WNW \rightarrow W^2N \rightarrow W^3 \quad (3.21)$$

se $h = 2$ allora

$$\omega[i, N] = W^2NE^2 \rightarrow SWN^2E \rightarrow SWN^2W \rightarrow \quad (3.22)$$

$$SW^2N^2 \rightarrow \dots \rightarrow SW^4 \rightarrow \dots \rightarrow W^5 \quad (3.23)$$

se $h > 2$ allora

$$\omega[i, N] = W^hNE^h \rightarrow SWNW^{h-2}NE^{h-1} \rightarrow SW^{h-1}N^2E^{h-1} \rightarrow \quad (3.24)$$

$$SW^{h-1}N^2E^{h-2}S \rightarrow SW^{h-1}N^2ESE^{h-3} \rightarrow \quad (3.25)$$

$$SW^hNE^{h-1} \rightarrow \dots \rightarrow SW^{2h} \rightarrow \dots \rightarrow W^{2h+1} \quad (3.26)$$

In ogni caso si arriva come prima a $\omega[i, N] = W^{2h+1}$.

La dimostrazione del passo di induzione è così terminata. In questo modo abbiamo provato che in un numero finito di passi si ottiene un cammino ω tale che esso è un cammino di Rattazzi oppure $x_0 = x_1 + t$. Se $x_2 = x_0$ ϖ è a forma di L ed è quindi banale. Dobbiamo perciò studiare il caso $x_2 > x_0$. Di nuovo procederemo per induzione. Assumeremo che il cammino ω abbia una torre parallela alla striscia che giace sul lato E rispetto alla base. Inizialmente noteremo che R_2 deve certamente contenere una curva a C dato che non contiene nessuno degli estremi. Si procede muovendo la torre su questa curva a C. Mostriamo poi che, se $x_2 > x_0$ e il cammino non è banale, si può modificarlo in modo tale che la torre aumenti in altezza. L'argomento è esattamente lo stesso di quello discusso in precedenza quando esiste una curva a C sulla retta $x = x_1 + t$. Q.E.D.

Nota 6: L'ipotesi 1. del lemma 6, riguardante la larghezza della striscia, è essenziale nella dimostrazione del teorema. L'ipotesi 2. entra invece solo per assicurare la validità del lemma 6. Possiamo dire che, con la sola ipotesi 1., il teorema 2 può essere enunciato nella forma: ogni cammino può essere ridotto ad un cammino di rattazzi.

3.2 Dimostrazione dell' ergodicità per l'algoritmo Satyr

Proveremo l'ergodicità, in una striscia bidimensionale, dell' algoritmo che include le seguenti mosse: mosse Satyr ($U \leftrightarrow$ estremo) e mosse (0) dal BFACF.

Teorema 3: L'algoritmo è ergodico in $d = 2$, se $w \geq 1$ e $N \geq 3$.

Dimostrazione : Per prima cosa mostriamo che, se $w \geq 1$, le due barre W^N e E^N possono essere deformate una nell'altra (E e W sono qui le direzioni parallele alla striscia). Infatti

$$E^N \rightarrow NESE^{N-3} \rightarrow WNE^2SE^{N-5} \rightarrow \dots \rightarrow \quad (3.27)$$

$$W^{N-2}NE \rightarrow W^{N-3}NWS \rightarrow W^N \quad (3.28)$$

Si consideri il rettangolo circoscritto $R[\omega]$ si definiscano R_1 e R_2 come i due lati di $R[\omega]$ perpendicolari alla striscia. Se R_1 e R_2 coincidono, ω è una sbarra verticale che può essere ridotta alla sbarra E^N (o W^N). Infatti, se il cammino è $\omega = N^N$, in un opportuno sistema di riferimento, allora

$$N^N \rightarrow ENWN^{N-3} \rightarrow E^2NW^2N^{N-5} \rightarrow \dots \rightarrow \quad (3.29)$$

$$E^{N-2}NW \rightarrow E^{N-3}NES \rightarrow E^N \quad (3.30)$$

Se R_1 e R_2 non coincidono, si supponga ω banale. Allora si potrà ridurre il cammino alla sbarra W^N o E^N . Con mosse (0) il cammino può essere trasformato in uno a forma di L, lasciando gli estremi fissati. Perendiamo poi il sistema di riferimento in modo che il cammino abbia la forma $E^{N-p}N^p$. Se disponessimo di mosse pivot sull'ultimo punto, questa sarebbe facilmente ridotta alla forma E^N . Invece noi utilizzeremo solo mosse Satyr. Distingueremo tre casi, in accordo al valore di p .

Caso 1: $p \geq 3$. Continuiamo ad aggiungere kinks sul link $\omega[N-p, N-p+1]$ togliendo links alla coda del cammino. Arriviamo così al cammino $E^{N-2}NW$, che può essere facilmente ridotto alla sbarra E^N mediante

$$E^{N-2}NW \rightarrow E^{N-3}NES \rightarrow E^N \quad (3.31)$$

Caso 2: $p = 2$.

$$\omega = E^{N-2}N^2 \rightarrow E^{N-3}NES \rightarrow E^N \quad (3.32)$$

Caso 3: $p = 1$.

$$\omega = E^{N-1}N \rightarrow E^{N-3}NES \rightarrow E^N \quad (3.33)$$

Supponiamo ora ω non banale. Se R_1 o R_2 non contengono $\omega(N)$, almeno uno di essi deve contenere una curva a C $\omega[i, j]$. Se $i < N-3$ continuiamo ad aggiungere kinks sul link $\omega[i+1, i+2]$ togliendo passi dalla fine del cammino, e orientando le kinks verso l'esterno di $R[\omega]$. Arriviamo così ad un cammino $\omega[0, i]$ contenuto nella regione tra R_1 e R_2 mentre la parte rimanente del cammino ha la forma (in un appropriato sistema di coordinate) E^kNW , con $k \geq 2$, che può essere facilmente ridotto ad una barra perpendicolare a R_1 mediante

$$E^kNW \rightarrow E^{k-1}NES \rightarrow E^{k+2} \quad (3.34)$$

Non può essere $i > N-3$, mentre, se $i = N-3$ allora $\omega[0, i]$ è contenuto nella regione tra R_1 e R_2 e i restanti tre links del cammino hanno la forma (nell'appropriato sistema di coordinate) ENW che di nuovo può essere ridotta ad una barra perpendicolare a R_1 .

Si consideri ora il nuovo cammino. $\omega(N)$ appartiene a R_1 o a R_2 . Se ω è non banale, il teorema 1 ci dice che ω contiene una curva a C non-ostruita. Usando mosse (0), possiamo ridurla e tagliare la kink risultante aggiungendo due passi all'estremo, ortogonalmente a R_1 . Finchè ω è non banale possiamo ripetere tale operazione. Dato che ad ogni passo si aggiungono due links all'estremo, questo processo è destinato a terminare. Quindi ω diventa banale completando così la dimostrazione.

Q.E.D.

Nota 7: Le mosse (0) dal BFACF sono necessarie per l'ergodicità. Si consideri per esempio i cammini della seguente forma, in una striscia di larghezza w

$$((EN)^w E (ES)^w E)^k E^2 \quad (3.35)$$

con $k \geq 1$ (la lunghezza di tale cammino è $N = (4w + 2) \cdot k + 2$).

In $d \geq 3$ si consideri l'algoritmo costituito dalle sole mosse Satyr ($U \leftrightarrow \text{last point}$).

Teorema 4: L'algoritmo è ergodico per qualunque $w \geq 0$ e $N \geq 3$.

Dimostrazione : La dimostrazione è limitata a $d = 3$, ma può essere facilmente adattata ad ogni dimensione più grande di tre. Inoltre è vera anche in $d = 2$ nello spazio libero, cioè per $w = \infty$.

Si consideri il cubo circoscritto $R[\omega]$. C'è almeno un passo del cammino giacente su una delle quattro facce di $R[\omega]$ che sono perpendicolari al contorno della striscia. Più precisamente, al massimo due delle facce possono contenere solo gli estremi, ma in questo caso ognuna delle altre due contiene almeno un punto distinto dagli estremi, contenendo quindi i passi precedenti o successivi ad essi. Anche nel caso in cui uno degli estremi appartenga allo stesso tempo a due facce perpendicolari, il link precedente o quello successivo deve appartenere ad almeno una di queste due facce.

Consideriamo tale passo $\Delta\omega(i)$ con i il più piccolo possibile. Sia R_1 la faccia contenente questo passo e sia E la direzione ortogonale ad R_1 che punta all'infuori rispetto a $R[\omega]$. Definiamo R_3 come la faccia opposta a R_1 , così W è la direzione che esternamente ad essa, e R_2 e R_4 rispettivamente la faccia N e quella S di $R[\omega]$.

Prima di tutto mostriamo che $i \leq N - 3$. Per definizione non può essere $i = N$. Se $i = N - 1$, dalla definizione di i , nessun altro passo del cammino può appartenere ad una faccia di $R[\omega]$, così un'altra faccia deve contenerlo, perchè almeno due facce contengono un passo del cammino. Se questa faccia è R_3 allora $R_1 = R_3$; questo forza $N = 1$, perchè in caso contrario $\Delta\omega(N - 2)$ apparterrebbe anche a $R_1 = R_3$ portando ad un assurdo, dato che per ipotesi è $N \geq 3$. Se tale faccia è R_2 (o R_4), in principio possibile se $\Delta\omega(i)$ è verticale, di nuovo deve essere $N = 1$, perchè in caso contrario $\Delta\omega(N - 2)$ apparterrebbe a R_1 o a R_2 (o R_4).

Se $i = N - 2$, supponiamo che $\Delta\omega(i)$ non appartenga ad un'altra faccia di $R[\omega]$, perchè in questo caso, con lo stesso argomento precedente, dovrebbe essere $N = 2$, in contrasto con le ipotesi. Dalla definizione di i l'unico altro passo del cammino che può appartenere ad una faccia di $R[\omega]$ è $\Delta\omega(N - 1)$. Se appartenesse a R_1 , ritorneremmo di nuovo al caso precedente che è già stato escluso. Se $\Delta\omega(N - 1) \in R_3$, allora $\omega(N - 1) \in R_1, R_3$ e di nuovo $R_1 = R_3$ e $N = 2$. Quindi $\Delta\omega(N - 1) \in R_2$ (o R_4). Si considerino ora le facce rimanenti. R_3 non può contenere $\Delta\omega(N - 2)$ ne $\Delta\omega(N - 1)$, per i precedenti argomenti. Anche R_4 (o R_2) non possono contenere $\Delta\omega(N - 2)$, ne $\Delta\omega(N - 1)$, perchè in questo caso sarebbe $R_2 = R_4$ e di nuovo $N = 2$. Segue che ognuna di queste due facce contengono uno degli estremi e solo esso. Deve essere $\omega(N) \in R_3$, altrimenti $R_2 = R_4$, e quindi la distanza fra R_1 e R_3 è esattamente 1. Consideriamo ora il passo $\Delta\omega(N - 3)$. Esso deve essere perpendicolare a R_1 , quindi $\omega(N - 3) \in R_3$. Se $N > 3$ allora $\Delta\omega(N - 4)$ apparterrebbe a R_3 , in contrasto con la definizione di i . Perciò $N = 3$, ma in questo caso $\omega(N - 3) = \omega(0) \in R_4$ (o R_2) e quindi $\Delta\omega(N - 3) \in R_4$ (o R_2), che di nuovo è in contrasto con la definizione di i . Rimangono quindi con la sola possibilità $N = 2$, che è esclusa per ipotesi.

Ora sia $i \leq N - 3$, e se E è la direzione perpendicolare a R_1 che punta all'esterno di $R[\omega]$, possiamo continuare ad aggiungere kinks su $\Delta\omega(i)$ nella direzione E "mangiando" due links per volta alla coda del cammino. Arriveremo così ad un cammino della forma

$\omega[i, N] = E^k XW$, con $k \geq 1$, dove chiamiamo genericamente X la direzione $\Delta\omega(i)$, che può essere N o S o verticale (su o giù). Allora

$$\omega[i, N] = E^k XW \rightarrow E^{k-1} XEX^{rev} \rightarrow E^{k+2} \quad (3.36)$$

dove X^{rev} è la direzione opposta a X .

Se $i = 0$ abbiamo finito. Il passo principale della dimostrazione sarà quello di mostrare che se $i > 0$ allora possiamo ripetere la ricerca del passo esterno con indice minimo $\Delta\omega(j)$, tale che j sia strettamente più piccolo di i . La procedura può quindi essere ripetuta solo un numero finito di volte, arrivando a $j = 0$ e concludendo così la dimostrazione.

Prima di andare avanti, bisogna provare che tutte le barre parallele al bordo della striscia possono essere deformate una nell'altra. Se N e S indicano le direzioni ortogonali ad E e W e parallele al bordo della striscia, dato che la lunghezza del cammino è maggiore od uguale a tre, si ha

$$E^N \rightarrow NESE^{N-3} \rightarrow N^{N-2}ES \rightarrow N^{N-3}ENW \rightarrow E^N \quad (3.37)$$

Supponiamo ora $i \neq 0$. Si consideri il nuovo cammino ω_1 ed il più piccolo j tale che $\Delta\omega_1(j)$ giaccia su una delle facce di $R[\omega_1]$, perpendicolarmente al bordo della striscia. Come sopra, sia R_1 la faccia di $R[\omega_1]$ orientata ad E , e R_3 quella opposta. Chiameremo di nuovo R_2 e R_4 rispettivamente la faccia a N e quella a S di $R[\omega_1]$. È facile vedere che R_1 si è spostata verso E di $N - i$ passi e che l'unico punto del cammino che appartiene a R_1 è $\omega_1(N)$. Consideriamo ora le altre tre facce. Allo stesso modo, almeno due di queste si sono spostate rispetto alla posizione precedente durante il passaggio da $R[\omega]$ a $R[\omega_1]$. Dalla definizione, almeno una di queste contiene ora $\Delta\omega_1(j)$. Mostriamo che $j < i$. Supponiamo per assurdo che questo non succeda, cioè che tutte le facce contengano punti del cammino $\omega_1(k)$ con $k \geq i$, o $\omega_1(0)$ ma non il passo $\Delta\omega_1(0)$. Per prima cosa notiamo che solo una faccia può contenere $\omega_1(0)$ ma non il passo $\Delta\omega_1(0)$, perchè se $\omega_1(0)$ appartiene allo stesso tempo a due facce perpendicolari, il passo $\Delta\omega_1(0)$ che parte da esso deve appartenere ad almeno una delle due facce (e se $\omega_1(0)$ appartiene a due facce parallele, allora queste facce coincidono e tutto ω_1 apparterra al bordo di $R[\omega_1]$). Quindi, almeno due fra R_2 , R_3 o R_4 conterranno almeno un punto $\omega_1(k)$ con $k \geq i$. Secondariamente si consideri il passo $\Delta\omega_1(i-1) = \Delta\omega(i-1)$. Per definizione di i questo passo è diretto verso E , quindi l'intero sottocammino $\omega_1[i-1, N]$ è una retta diretta verso E . Il fronte W R_3 al massimo può raggiungere $\omega_1(i-1)$ ma non può procedere oltre verso E , quindi R_3 non può contenere nessun $\omega_1(k)$ con $k \geq i$. R_2 e R_4 conterranno quindi almeno un punto $\omega_1(k)$ con $k \geq i$ ognuno. Tutti questi punti giacciono in una linea retta parallela a R_2 e R_4 , e quindi $R_2 = R_4$ e l'intero ω_1 apparterranno al bordo di $R[\omega_1]$. Ciò è in contraddizione con l'ipotesi che $j \geq i$, ottenendo un assurdo. Abbiamo così provato che $j < i$ e, come notato in precedenza, questo completa la dimostrazione.

Q.E.D.

Nota 8: La dimostrazione di questo teorema non richiede le mosse (0) del BFACF, che quindi non sono necessarie per l'ergodicità in tre o più dimensioni. Se si prova a riprodurre questa dimostrazione in $d = 2$ (ancora senza le mosse (0)), il controesempio della Nota 7 mostra che ciò non sarà possibile a causa del bordo.

3.3 Dimostrazione dell'ergodicità per l'algoritmo Reptation modificato

Proveremo ora l'ergodicità in due dimensioni per il seguente algoritmo: mosse reptation, mosse (22) e mosse (0).

Teorema 5: L'algoritmo è ergodico in $d = 2$, $w \geq 1$.

Dimostrazione: Inizialmente si noti che, se $w \geq 1$, le due barre W^N e E^N possono essere facilmente deformate l'una nell'altra (E e W sono le direzioni parallele alla striscia). Ora si consideri il rettangolo circoscritto $R[\omega]$ e definiamo R_1 e R_2 come i due lati di $R[\omega]$ perpendicolari alla striscia. Se uno dei due estremi appartiene a R_1 o R_2 abbiamo finito. Se nessuno degli estremi appartiene a R_1 o R_2 , questi due lati devono contenere almeno una curva a C per ciascuno. Inoltre ω sia non banale. Allora ω deve contenere una curva a C non-ostruita. Si può quindi ridurre quest'ultima, tagliare la kink che ne risulta e costruire una torre $T[l, 1]$ su una delle (almeno) due curve a C laterali (la scelta è arbitraria se nessuna delle curve a C sul bordo laterale è quella non-ostruita, altrimenti si considera una curva a C sul lato di $R[\omega]$ opposto a quello contenente la curva a C non-ostruita).

Chiamiamo ancora ω il nuovo cammino, e consideriamo $\bar{\omega} = \omega/T(l, 1)$, con rettangolo circoscritto $R[\bar{\omega}]$. Come prima definiamo R_1 e R_2 come i due lati di $R[\bar{\omega}]$ perpendicolari alla striscia. Per costruzione, almeno uno di questi lati non è cambiato, cioè quello contenente la curva a C sopra la quale è stata costruita la torre. Se ora uno dei due estremi appartiene a R_1 o a R_2 abbiamo finito. Qualche parola di cautela è non di meno necessaria. A prima vista, l'estremo sul bordo può essere fermato nello scivolamento dalla torre stessa, se costruita proprio sopra di esso. Infatti R_1 e R_2 sono il bordo laterale di $\bar{\omega}$ e non del vero ω . Comunque se fosse così l'estremo considerato apparterrebbe a R_1 o a R_2 già dall'inizio dato che la torre sta sul lato non modificato. Se nessuno degli estremi appartiene al bordo laterale, allora $\bar{\omega}$ è non banale e quindi contiene una curva a C non-ostruita. Se questa curva a C contiene la base della torre, si muova la torre su una curva a C appartenente al lato opposto di $R[\bar{\omega}]$. Si tagli poi la curva a C e si aggiunga una kink alla torre. Ad ogni passo la torre si alza di un unità. Il processo deve necessariamente terminare, e la dimostrazione risulta così completata.

Q.E.D.

Nota 9: Le mosse (0) del BFACF sono necessarie per l'ergodicità. Si consideri infatti il cammino con $N = 22$:

$$N^2W^2S^2ESE^2N^2E^2SES^2W^2N^2$$

Nota 10: Le mosse (22) sono anch'esse necessarie per l'ergodicità. Si consideri infatti il cammino con $N = 13$:

$$NWS^2E^2NE^2S^2WN$$

Nota 11: Questa dimostrazione non è estendibile in modo immediato al caso $d = 3$. Anzi è possibile che in $d = 3$ quest'algoritmo non sia ergodico a causa di configurazioni in cui entrambi gli estremi sono intrappolati ed in cui non sono presenti kink che permettano l'utilizzazione delle mosse (22). Se esiste un tale cammino "congelato", esso conterrà probabilmente nodi grazie a cui si possono formare configurazioni compatte in cui gli

estremi rimangono intrappolati, senza l'utilizzo di kinks. In ogni caso ci si aspetta che, se una tale configurazione esiste, essa, non dovendo contenere kinks, sia costituita da un numero di links piuttosto elevato, e che la non-ergodicità, per cammini di lunghezza $N = 100-1000$, non influisca sulle simulazioni Monte Carlo dato che le classi di ergodicità in cui l'algoritmo non campiona sono probabilmente molto piccole.

3.4 Studio teorico dell' algoritmo Bilocal

Veniamo ora allo studio teorico dell' algoritmo Bilocal, costituito dalle mosse (22),(0),(1) con l'aggiunta della mossa locale consistente nella rotazione di 90° o 180° gradi di una kink (mosse D ed E in Fig. 2.2), che chiameremo mossa (00). Quest' ultima è il risultato di una mossa $\Delta N = -2$ che toglie una kink da un punto del cammino e di una mossa $\Delta N = +2$ che ne inserisce una nuova nello stesso punto, con orientazione diversa rispetto alla prima; non essendo necessaria nella prova dell' ergodicità, essa non è stata introdotta nella sezione 3.1. Un iterazione dell'algoritmo Bilocal consiste nelle seguenti operazioni:

1. Si sceglie in modo casuale un sito del cammino; se il sito scelto è l'ultimo del cammino si procede con una mossa del tipo (1) (che quindi viene eseguita con una probabilità di $1/(N+1)$), ed in questo caso l'iterazione è completata. Altrimenti si sceglie casualmente un' altro sito del cammino, ad eccezione dell' ultimo e di quello già scelto che portano ad una transizione nulla (ogni coppia di siti distinti non comprendenti l' estremo viene quindi scelto con eguale probabilità).
2. Si elencano le $2d-2$ possibili deformazioni del primo legame (cioè quello successivo al primo sito scelto), prima per mosse $\Delta N = 0$, e poi accoppiando le altre con le deformazioni possibili per il secondo legame (successivo al secondo sito scelto) che abbiano $\Delta N' = -\Delta N$ (in questo caso alcune coppie eccezionali possono essere scartati provocando una transizione nulla).
3. Si sceglie casualmente tra queste deformazioni, dando ad ognuna di esse una probabilità $p(T)$ dipendente dal tipo di mossa solamente. Se la somma delle probabilità delle possibili deformazioni è $s < 1$, allora si fa una transizione nulla $\omega \rightarrow \omega$ con probabilità $1-s$.
4. Si controlla se il nuovo cammino proposto è self-avoiding. Se lo è si tiene, altrimenti si fa una transizione nulla.

Segue che la matrice di transizione è data da

$$P(\omega \rightarrow \omega') = \frac{1}{|\omega|} p(T) \chi_{SAW}(\omega') \quad \text{se } T = 0 \text{ o } T = 00 \quad (3.38)$$

e ¹

$$P(\omega \rightarrow \omega') = \frac{1}{|\omega|} \frac{1}{|\omega| - 1} p(T) \chi_{SAW}(\omega') \quad \text{se } T = 22 \quad (3.39)$$

¹per evitare patologie, se il secondo legame è segue o precede immediatamente il primo, allora si fa una transizione nulla. Lo stesso risultato si può ottenere scegliendo a priori il secondo legame tra $|\omega| - 3$ legami, incrementando così la probabilità di una mossa (22), anche se nel limite di grandi $|\omega|$ non c'è differenza.

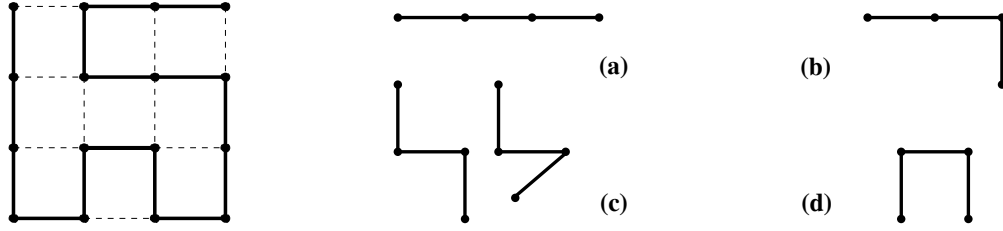


Figura 3.1: (1) Configurazione a bassa energia per la quale dovrebbero essere efficaci le mosse bilocali. (2) Configurazioni di tre link consecutivi: (a) configurazione ad I; (b) configurazione a L; (c) configurazione a S; (d) configurazione ad U.

per $\omega \neq \omega'$, dove

$$\chi_{SAW}(\omega') = \begin{cases} 1 & \text{se } \omega' \text{ è self-avoiding} \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (3.40)$$

Affinchè l'algoritmo abbia senso dobbiamo imporre le disuguaglianze

$$\sum_{\omega' \neq \omega} P(\omega \rightarrow \omega') \leq 1 \quad (3.41)$$

per tutti gli ω , e dobbiamo poi imporre l'equazione del bilancio dettagliato rispetto alla distribuzione di probabilità uniforme sui SAW's (che serve anche per poter applicare l'algoritmo Metropolis una volta introdotta l'interazione)

$$P(\omega \rightarrow \omega') = P(\omega' \rightarrow \omega) \quad (3.42)$$

per tutti gli ω e ω' (quest' ultima è automaticamente soddisfatta). Per vedere cosa implica l' Eq. (3.41) consideriamo il modo in cui viene implementato il secondo passo dell' algoritmo. Per entrambi i legami scelti, si confronta la loro direzione con quella del legame precedente e del successivo lungo la catena. Come illustrato in Fig. 3.1 ci sono quattro casi ²:

1. le direzioni di tutti e tre i legami sono le stesse (configurazione ad I)
2. due legami consecutivi hanno la stessa direzione mentre il terzo è perpendicolare (configurazione ad L)
3. il precedente e il successivo sono perpendicolari al legame scelto e antiparalleli fra di loro (configurazione a kink o ad U)
4. il precedente ed il successivo sono perpendicolari al legame scelto ma non sono antiparalleli fra di loro (configurazione ad S)

Si prende poi in esame la configurazione del primo legame scelto e dei due suoi vicini e si elencano le possibili sue deformazioni con mosse locali (del tipo (0) o (00)); considerando la configurazione del secondo legame scelto si enumerano le possibili deformazioni

²se i legami scelti sono il primo o l'ultimo della catena, c'è un solo legame vicino. Comunque la presente classificazione rimane valida se si immagina che il legame mancante abbia la stessa direzione di quello centrale

contemporanee delle due configurazioni dovute a mosse bilocali (del tipo (22)). La configurazione 1 permette solo mosse bilocali ($2d - 2$ e nel solo caso in cui il secondo legame formi una configurazione ad U); la 2 permette una sola deformazione locale del tipo (0) e $2d - 3$ mosse bilocali (nel solo caso in cui il secondo legame formi una configurazione ad U); la 3 permette al massimo $2d - 3$ mosse locali del tipo (00) e $2(2d - 3)$ mosse bilocali (nel caso in cui il secondo legame formi una configurazione ad U); la 4 permette due mosse locali del tipo (0) e $(2d - 4)$ mosse bilocali (nel solo caso in cui il secondo legame formi una configurazione ad U). Questo si traduce nelle seguenti condizioni sulle $p(T)$

$$(2d - 2)p(22) \leq 1 \quad (3.43)$$

$$(2d - 3)p(22) + p(0) \leq 1 \quad (3.44)$$

$$2(2d - 3)p(22) + (2d - 3)p(00) \leq 1 \quad (3.45)$$

$$(2d - 4)p(22) + 2p(0) \leq 1 \quad (3.46)$$

$$2p(0) \leq 1 \quad (3.47)$$

Omettendo (3.44), conseguenza delle (3.43) e (3.46), e (3.47) che segue da (3.46), si rimane con

$$(2d - 2)p(22) \leq 1$$

$$(4d - 6)p(22) + (2d - 3)p(00) \leq 1 \quad (3.48)$$

$$(2d - 4)p(22) + 2p(0) \leq 1$$

Una soluzione di (3.48), che massimizza $p(0)$ e $p(00)$ a $p(22)$ fissata, è

$$\begin{aligned} p(0) &= \frac{1}{2}[1 - (2d - 4)p(22)] \\ p(00) &= \frac{1}{2d-3}[1 - (4d - 6)p(22)] \\ p(22) &\leq \frac{1}{4d-6} \end{aligned} \quad (3.49)$$

Dato che la mossa del tipo (00) non è necessaria per l'ergodicità e che la mossa (22) velocizza la dinamica rispetto ad una mossa locale, nella realizzazione pratica dell' algoritmo si è optato per la massimizzazione di $p(22)$ a scapito di $p(00)$, che si è posta uguale a zero. Si ottengono così le seguenti probabilità

$$\left. \begin{aligned} p(0) &= 1/2 \\ p(00) &= 0 \\ p(22) &= 1/2 \end{aligned} \right\} \text{ in } d = 2 \quad \left. \begin{aligned} p(0) &= 1/3 \\ p(00) &= 0 \\ p(22) &= 1/6 \end{aligned} \right\} \text{ in } d = 3 \quad (3.50)$$

3.5 Studio teorico dell' algoritmo Satyr

In questo algoritmo si utilizzano mosse del tipo kink-end reptation (detto anche “stretching”) e end-kink reptation (detto anche “cramping”) (vedi Fig. 2.5) Esistono due modi di realizzare in pratica questo algoritmo. A priori non si hanno sufficienti informazioni per stabilire quale dei due sia il più efficiente, perchè, come vedremo successivamente,

non sono note né le probabilità di accettazione per i due tipi di mosse possibili, né le probabilità con cui occorrono le diverse configurazioni di tre passi successivi del SAW (usare le analoghe probabilità per il non-reversal random walk è un'approssimazione troppo brutale per riuscire a fare il confronto fra i due metodi). Queste ultime possono essere misurate in altre simulazioni, dato che, ovviamente, non dipendono dall'algoritmo usato.

Veniamo al primo modo di realizzazione. Un'iterazione di questo algoritmo consiste nelle seguenti operazioni:

1. Si sceglie in modo casuale un link del cammino ad esclusione degli ultimi due.
2. Si tenta una mossa “cramping” con probabilità $p(CR)$ o una mossa “stretching” con probabilità $p(ST) = 1 - p(CR)$. Nel primo caso si tolgono gli ultimi due link del cammino e si reinseriscono a formare una U in corrispondenza del link scelto al passo precedente (ci sono quindi, al massimo, $(2d - 2)$ orientazioni possibili per essa). Nel secondo caso si controlla la presenza di una U formata dal link scelto al punto precedente, e dai due successivi. In caso affermativo si procede alla rimozione della U e all'attacco dei due link alla fine del cammino in uno dei $(2d - 1)^2$ modi possibili; in caso negativo si procede con una “transizione nulla”.
3. Si controlla se il nuovo cammino proposto è self-avoiding. Se lo è si tiene, altrimenti si fa una transizione nulla.

Segue che la matrice di transizione è data da

$$P(\omega \rightarrow \omega') = \frac{1}{(|\omega| - 2)} p(T) \frac{1}{(2d - 2)} \chi_{SAW}(\omega') \quad \text{se } T = CR \quad (3.51)$$

e

$$P(\omega \rightarrow \omega') = \frac{1}{(|\omega| - 2)} p(T) \frac{1}{(2d - 1)^2} \chi_{SAW}(\omega') \quad \text{se } T = ST \quad (3.52)$$

per $\omega \neq \omega'$, dove $\chi_{SAW}(\omega')$ è definita nell' Eq.(3.40). Dobbiamo poi imporre le disuguaglianze

$$\sum_{\omega' \neq \omega} P(\omega \rightarrow \omega') \leq 1 \quad (3.53)$$

per tutti gli ω , che sono automaticamente verificate ponendo $p(ST) + p(CR) = 1$, e l'equazione del bilancio dettagliato rispetto alla distribuzione di probabilità uniforme sui SAW's (che serve anche per poter applicare l'algoritmo Metropolis una volta introdotta l'interazione)

$$P(\omega \rightarrow \omega') = P(\omega' \rightarrow \omega) \quad (3.54)$$

per tutti gli ω e ω' . Quest'ultima, da sola, determina completamente le probabilità $p(CR)$ e $p(ST)$ infatti si ha

$$p(ST)(2d - 2) = p(CR)(2d - 1)^2 \quad (3.55)$$

da cui, usando $p(CR) + p(ST) = 1$,

$$\begin{aligned} p(ST) &= \frac{(2d-1)^2}{(2d-1)^2 + (2d-2)} \\ p(CR) &= \frac{2d-2}{(2d-1)^2 + (2d-2)} \end{aligned} \quad (3.56)$$

Si ottengono così le seguenti probabilità

$$\left. \begin{array}{l} p(CR) = 2/11 \\ p(ST) = 9/11 \end{array} \right\} \text{in } d=2 \quad \left. \begin{array}{l} p(CR) = 4/29 \\ p(ST) = 25/29 \end{array} \right\} \text{in } d=3 \quad (3.57)$$

Il secondo modo di realizzare l'algoritmo è, come concezione, simile a quello dell'algoritmo Bilocal. Un iterazione consiste nelle seguenti operazioni:

1. Si sceglie in modo casuale un link del cammino ad eccezione degli ultimi due.
2. Si elencano le possibili deformazioni del primo link per mosse "cramping" e "stretching" (se la configurazione attorno ad esso non è una U solo mosse di cramping sono possibili).
3. Si sceglie casualmente tra queste deformazioni, dando ad ognuna di esse una probabilità $p(T)$ dipendente solo dal tipo di mossa. Se la somma delle probabilità delle possibili deformazioni è $s < 1$, allora si fa una transizione nulla $\omega \rightarrow \omega$ con probabilità $1 - s$.
4. Si controlla se il nuovo cammino proposto è self-avoiding. Se lo è si tiene, altrimenti si fa una transizione nulla.

Segue che la matrice di transizione è data da

$$P(\omega \rightarrow \omega') = \frac{1}{(|\omega| - 2)} p(T) \chi_{SAW}(\omega') \quad \text{dove } T = CR \text{ o } T = ST \quad (3.58)$$

per $\omega \neq \omega'$, dove $\chi_{SAW}(\omega')$ è definita nell' Eq.(3.40). Dobbiamo poi imporre, come al solito le disuguaglianze

$$\sum_{\omega' \neq \omega} P(\omega \rightarrow \omega') \leq 1 \quad (3.59)$$

per tutti gli ω , e l'equazione del bilancio dettagliato rispetto alla distribuzione di probabilità uniforme sui SAW's

$$P(\omega \rightarrow \omega') = P(\omega' \rightarrow \omega) \quad (3.60)$$

per tutti gli ω e ω' . Quest'ultima impone $p(ST) = p(CR)$ mentre Eq. (3.59) implica le seguenti condizioni

$$(2d - 2)p(CR) \leq 1 \quad (3.61)$$

$$(2d - 3)p(CR) \leq 1 \quad (3.62)$$

$$(2d - 1)^2 p(ST) + (2d - 3)p(CR) \leq 1 \quad (3.63)$$

$$(2d - 4)p(22) \leq 1 \quad (3.64)$$

Si ottengono le condizioni

$$p(ST) = p(CR) \leq \frac{1}{2d-2} \quad (3.65)$$

$$p(ST) = p(CR) \leq \frac{1}{(2d-3)+(2d-1)^2}$$

Si può prendere quindi la prima delle due con il segno di uguaglianza ottenendo $p(ST) = p(CR) = 1/10$ in $d = 2$ e $p(ST) = p(CR) = 1/28$ in $d = 3$.

Un indicazione su quale dei due algoritmi sia più efficiente si ottiene calcolando la probabilità di una transizione nulla nei due casi. Per calcolare questa probabilità è necessario, come detto sopra, conoscere le probabilità di occorrenza per i quattro tipi di configurazioni di tre link consecutivi. I valori ottenuti dalle simulazioni sono i seguenti:

d	$p(\mathbf{l})$	$p(\mathbf{L})$	$p(\mathbf{U})$	$p(\mathbf{S})$
2	0.152	0.481	0.108	0.259
3	0.051	0.356	0.102	0.491

Il conto della probabilità di una transizione nulla è immediato ed in $d = 2$, per il primo algoritmo, si ottiene

$$\begin{aligned} p(null) = & p(\mathbf{l})p(ST) + p(\mathbf{L})\left(p(ST) + \frac{1}{2}p(CR)\right) + \\ & + p(\mathbf{U})\frac{1}{2}p(CR) + p(\mathbf{S}) = 0.830 \end{aligned} \quad (3.66)$$

mentre per il secondo algoritmo (ponendo $p(CR) = p(ST) = p$)

$$p(null) = p(\mathbf{l})(1 - 2p) + p(\mathbf{L})(1 - p) + p(\mathbf{S}) = 0.814 \quad (3.67)$$

Analogamente in $d = 3$, per il primo algoritmo

$$\begin{aligned} p(null) = & p(\mathbf{l})p(ST) + p(\mathbf{L})\left(p(ST) + \frac{1}{4}p(CR)\right) + \\ & + p(\mathbf{U})\frac{1}{4}p(CR) + p(\mathbf{S})\left(p(ST) + \frac{1}{2}p(CR)\right) = 0.824 \end{aligned} \quad (3.68)$$

mentre per il secondo algoritmo (sempre con $p(CR) = p(ST) = p$)

$$p(null) = p(\mathbf{l})(1 - 4p) + p(\mathbf{L})(1 - 3p) + p(\mathbf{S})(1 - 2p) = 0.818 \quad (3.69)$$

Come si vede, sia in due che in tre dimensioni, la differenza fra i due algoritmi è minima. Inoltre il calcolo della probabilità di una mossa nulla dà solo un'indicazione in quanto, per conoscere l'efficienza reale, bisognerebbe avere a disposizione la probabilità che ciascun tipo di mossa venga proposta insieme alla probabilità che venga accettata. La prima delle due può essere calcolata in modo analogo a quanto visto sopra, mentre la seconda va ricavata necessariamente tramite simulazioni. A questo punto, dato che il calcolo precedente sembra indicare un comportamento molto simile per i due algoritmi, e che, per ottenere ulteriori informazioni sarebbe necessaria la realizzazione pratica di entrambi, si è deciso di implementare solamente quello di più semplice realizzazione.

Capitolo 4

Simulazioni a $\beta = 0$: risultati numerici e analisi statistica

In questo capitolo verranno discussi i risultati numerici delle simulazioni Monte Carlo ad alta statistica effettuate per studiare il comportamento dinamico dei nuovi algoritmi, trattati approfonditamente dal punto di vista teorico nel capitolo precedente. Essi possono essere considerati come sistemi dinamici in regime critico ed è quindi di grande importanza lo studio degli esponenti critici che ne caratterizzano il comportamento nella regione di scaling. Infatti, così come per i fenomeni critici statici, anche per quelli dinamici esistono classi di universalità, caratterizzate come sempre dal valore delle grandezze universali. In questo caso le grandezze più importanti sono gli esponenti critici dinamici per il tempo di autocorrelazione integrato ed esponenziale (che, come spiegato a pagina 34 e contrariamente a quanto supposto usualmente in letteratura, non sono sempre uguali), per varie osservabili. In questo lavoro viene effettuato per la prima volta, grazie all'elevata statistica raccolta, uno studio sistematico delle funzioni di autocorrelazione delle varie osservabili misurate, estraendo sia tempi integrati che esponenziali e relativi esponenti dinamici, e verificando in quali casi valga la legge di scaling dinamico per le funzioni di autocorrelazione, e se questa dia risultati per gli esponenti critici concordanti con i valori misurati direttamente.

I due algoritmi implementati nella pratica sono una combinazione dei seguenti:

1. Bilocal più Reptation: composto da un'iterazione di Bilocal (vedi pagina 60) più un' iterazione di Reptation. Quest'ultima consiste semplicemente in una mossa di tipo “reptation” (vedi pagina 36), in cui si sceglie l'estremo dal quale si vuole togliere il link con probabilità $1/2$.
2. Bilocal più Satyr: composto da un'iterazione di Bilocal più un' iterazione di Satyr (nel primo modo di realizzazione; vedi pagina 63).

Dai nostri risultati, il primo risulta considerevolmente più efficiente rispetto al secondo nella misurazione dei raggi e dei rapporti fra le loro ampiezze mentre meno efficiente nella misura dell'energia. Si è quindi deciso di studiare il comportamento di entrambi in $d = 2$ mentre solo del primo dei due in $d = 3$. Come si è detto nella Nota 11 a pag. 59, non è noto se tale algoritmo sia ergodico anche in $d = 3$. In ogni caso è probabile che per cammini di lunghezze dell'ordine di $N = 100 - 1000$, la possibile non-ergodicità sia in ogni caso poco rilevante, in quanto ci si aspetta che le configurazioni congelate abbiano un numero di

links piuttosto elevato e che le corrispondenti classi ergodiche siano piccole nel caso degli N da noi considerati. Rimane perciò di interesse lo studio delle caratteristiche dinamiche dell'algoritmo, anche nel caso in cui queste riguardino solo la classe di ergodicità principale.

4.1 Programmi utilizzati: caratteristiche generali

Il programma di simulazione genera le configurazioni su cui vengono misurati valori dell'energia e dei raggi. Esso è strutturato in modo che si possa regolare indipendentemente il numero di iterazioni dell'algoritmo che intercorrono fra successive misurazioni di questi due tipi diversi di osservabili allo scopo di salvare su file misure con livello di correlazione all'incirca uguale per entrambi. Dato che l'energia si decorrela più velocemente, il numero di misure sarà maggiore per questo osservabile piuttosto che per i raggi.

Per rendere l'aggiornamento del cammino, dopo ogni iterazione, semplice, e quindi veloce dal punto di vista computazionale, è fondamentale la scelta della struttura dati per l'immagazzinamento. Per il movimento di gruppi di siti (mosse locali o globali che conservano N , dove N è la lunghezza del cammino) e l'aggiunta o la cancellazione di siti all'inizio ed alla fine del cammino (mosse "reptation") sarebbe sufficiente l'utilizzo di una lista circolare in cui le posizioni dei siti siano allocate sequenzialmente. Questa struttura però non permette facilmente l'inserimento di uno o più siti all'interno del cammino (come richiesto dalle mosse bilocali) dato che questo richiederebbe lo spostamento di una larga parte del cammino ed un tempo computazionale di ordine N .

Tale problema si risolve con l'utilizzo di una struttura vettoriale in cui vengono salvate, in modo contiguo ma non consecutivo, le posizioni dei siti appartenenti al cammino e due liste di puntatori che indicano, fissato un sito, la collocazione all'interno del vettore delle coordinate, dei due siti primi vicini consecutivi. Dato che la lista è riempita in modo contiguo, la scelta di un sito in modo casuale è banale; inoltre l'addizione o la sottrazione di un sito all'interno del cammino richiedono un tempo complessivo di ordine 1.

Una volta proposta una mossa, essa deve superare il test di self-avoidance. Per controllare la presenza o meno di un nuovo sito nella lista usata per l'immagazzinamento si impiegherebbe un tempo di ordine N e quindi enorme. Per evitare tale inconveniente si può utilizzare in parallelo un'altra struttura dati come ad esempio una *bit-table* o una *hash-table*.

La bit-table è semplicemente un blocco di memoria in cui, ad ogni possibile valore per la variabile da controllare (in questo caso le coordinate dei siti nella zona di reticolo raggiungibile dal cammino), è assegnato un bit: 1 se il valore è già stato assunto in precedenza, 0 in caso contrario. In Il controllo è così immediato, anche se l'utilizzo di memoria diventa proibitivo, specialmente in $d > 2$, già per cammini di $N \sim 10^3$.

Per risolvere il problema si introduce la hash-table che è costituita da una lista contenente un numero di elementi M inferiore alla cardinalità dell'insieme K dei valori possibili. Ad ogni elemento $x \in K$ si assegna un indirizzo primario $h(x)$ nella lista; naturalmente la funzione h (chiamata di "hash") non sarà iniettiva e come conseguenza si potranno avere delle "collisioni" fra elementi diversi di K indirizzati sullo stesso elemento della lista.

A questo punto esistono vari algoritmi per "risolvere" le collisioni, ovvero per decidere dove immagazzinare un elemento $x \in K$ il cui indirizzo primario sia già occupato. Quello

da noi utilizzato è costituito da due hash-table: nelle prima si immagazzinano gli elementi che trovano il loro indirizzo primario libero (determinato dalla funzione $h(\omega_i) = \text{mod}(a_1 \cdot \text{mod}(\omega_{i,x}, b) + a_2 \cdot \text{mod}(\omega_{i,y}, b), b)$ dove ω_i è un sito del cammino e dove a_1, a_2, b sono costanti scelte secondo criteri specifici) mentre nella seconda si immagazzinano gli altri, creando, per mezzo di puntatori $p_{h(x)}$, delle sottoliste secondarie $l_{h(x)}$ contenenti elementi ad uguale indirizzo primario $h(x)$. In questa seconda hash-table, per trovare posto agli elementi di ciascuna sottolista, si utilizza una funzione di “hash” del tipo $\tilde{h}(h(x)) = \text{mod}(h(x) + i, m)$, dove $i = 0, 1, \dots, m - 1$ e dove m è la dimensione della seconda hash-table. Partendo da $i = 0$, si incrementa di un’ unità finchè \tilde{h} non punta ad uno spazio vuoto; a questo punto si aggiorna il puntatore $p_{h(x)}$ aggiungendo l’indirizzo, appena trovato, dell’ultimo elemento di $l_{h(x)}$. Essendo predisposto anche per l’uso dell’algoritmo non locale “pivot”, si è dotato il programma è stato dotato di due strutture dati, una “attiva” e l’altra “scratch”. Quest’ultima serve per registrare le mosse globali proposte man mano che se ne testa la self-avoidance. Se il processo ha successo, le due strutture si scambiano di ruolo, altrimenti quest’ultima viene cancellata e si passa all’iterazione successiva.

Il programma di analisi dati è stato costruito in modo da poter analizzare un numero qualsiasi di misure suddivise in gruppi di uguale dimensione (dell’ordine di $10^5 - 10^6$ misure). Questo per due motivi: poter aggiornare nel corso dell’ analisi, a seconda delle caratteristiche specifiche del campione di misure in esame, i parametri fissati all’inizio (risparmiando così lavoro inutile); evitare problemi di memoria dovuti all’ eccessivo numero di misure da immagazzinare durante l’analisi. I pacchetti di misure vengono caricati circolarmente in un buffer (di dimensioni maggiori del singolo pacchetto) aggiornando il calcolo dei valori medi, delle varianze, delle funzioni di autocorrelazione $\rho(t)$ e dei tempi integrati τ_{int} , di volta in volta dopo il caricamento di ogni nuovo gruppo di misure. Le funzioni di autocorrelazione sono calcolate fino ad un valore τ_{max} che viene modificato all’aumentare del numero di misure analizzate (si riduce in conseguenza della diminuzione dell’incertezza sulla stima di τ_{int}). In pratica si è trovato comodo generare file con 50000 misure (di raggi), analizzando 20, 40 o 60 file per volta. In questo modo si sono ottenuti, a seconda del campione complessivo di misure, $\sim 50 - 100$ risultati parziali delle analisi, su cui fare statistiche per assegnare errori non facilmente calcolabili in altro modo e controllare stime fatte a priori.

4.2 Bilocal più Reptation in $d = 2$ ed in $d = 3$

Sono state eseguite simulazioni in dimensione $d = 2$ (reticolo quadrato) e $d = 3$ (reticolo cubico) per SAWs di lunghezze $N = 100, 300, 1000$. Le tabelle 4.1, 4.2, 4.3 mostrano le stime ottenute per il raggio quadratico medio di girazione $\langle R_g^2 \rangle_N$, la distanza quadratica media fra gli estremi $\langle R_e^2 \rangle_N$, la distanza quadratica media dall’ origine $\langle R_m^2 \rangle_N$, l’ energia \mathcal{E} ed i rapporti di ampiezze A_N, B_N, C_N . Le stime sono in accordo, entro gli errori, con quelle dei lavori a più alta precisione realizzati fino ad oggi (vedi ad esempio Li *et al.* [11]). In quest’ultimo lavoro, allo scopo di ottenere una stima dell’ esponente critico ν scevra da effetti sistematici di correzioni allo scaling, vengono effettuate simulazioni con l’algoritmo pivot su cammini di lunghezze fino a $N = 8 \cdot 10^4$. Fermandosi a lunghezze dell’ ordine di $N \sim 10^3$, i valori di ν risulteranno affetti da un errore sistematico molto più grande di quello statistico. Nel nostro caso (vedi tab. 4.4) si ottengono infatti valori

d	N	n° misure	$\langle R_g^2 \rangle_N$	$\langle R_e^2 \rangle_N$	$\langle R_m^2 \rangle_N$
2	100	$2.883 \cdot 10^8$	109.347 ± 0.013	780.106 ± 0.142	342.425 ± 0.048
	300	$2.690 \cdot 10^8$	564.151 ± 0.078	4024.57 ± 0.80	1768.401 ± 0.277
	1000	$2.300 \cdot 10^7$	3424.98 ± 1.61	24422.1 ± 16.1	10734.82 ± 5.59
3	100	$2.730 \cdot 10^8$	41.9275 ± 0.0060	265.052 ± 0.052	126.260 ± 0.020
	300	$2.760 \cdot 10^8$	154.983 ± 0.023	976.35 ± 0.19	467.081 ± 0.073
	1000	$2.600 \cdot 10^7$	645.17 ± 0.31	4053.20 ± 2.52	1943.39 ± 0.98

Tabella 4.1: Stime per le misure “classiche” della *dimensione* di un SAW di N passi (l’errore è una deviazione standard).

d	N	n° misure	A_N	B_N	C_N
2	100	$2.883 \cdot 10^8$	0.140169 ± 0.000012	0.438947 ± 0.000030	0.319330 ± 0.000015
	300	$2.690 \cdot 10^8$	0.140177 ± 0.000012	0.439401 ± 0.000032	0.319018 ± 0.000016
	1000	$2.300 \cdot 10^7$	0.140241 ± 0.000042	0.439554 ± 0.000106	0.319053 ± 0.000055
3	100	$2.730 \cdot 10^8$	0.158186 ± 0.000013	0.476358 ± 0.000033	0.332073 ± 0.000017
	300	$2.760 \cdot 10^8$	0.158737 ± 0.000013	0.478394 ± 0.000033	0.331813 ± 0.000017
	1000	$2.600 \cdot 10^7$	0.159176 ± 0.000041	0.47947 ± 0.00010	0.331983 ± 0.000053

Tabella 4.2: Stime per i rapporti universali fra ampiezze (l’errore è una deviazione standard).

di ν sensibilmente differenti da quelli riportati in sezione 1.5,1.6, ma in accordo con le stime dei lavori [31], [24], precedenti a quello di Li *et al.*, nei quali vengono generalmente utilizzati cammini con lunghezze $10^2 \leq N \leq 5 \cdot 10^3$ passi.

Gli errori per raggi ed energia sono stati calcolati secondo la (2.41) mentre per quelli sui rapporti fra le ampiezze si è dovuto usare un piccolo accorgimento. In generale, infatti, per calcolare rapporti invarianti del tipo $R = \frac{\langle A \rangle^p}{\langle B \rangle^q}$ si usa come stima $R_{est} = \frac{\bar{A}^p}{\bar{B}^q}$ (che è leggermente “biased”) dove \bar{A}, \bar{B} sono le medie campioni di A, B . Dato che R_{est} è il rapporto fra due quantità che provengono dalla stessa simulazione, e quindi correlate, non è chiaro quale sia la sua varianza. Calcoliamola

$$\text{var}(R_{est}) = \langle \frac{\bar{A}^{2p}}{\bar{B}^{2q}} \rangle - \langle R_{est} \rangle^2 \quad (4.1)$$

ed introduciamo poi

$$\Delta A = \frac{\bar{A} - \langle A \rangle}{\langle A \rangle} \quad \text{e} \quad \Delta B = \frac{\bar{B} - \langle B \rangle}{\langle B \rangle} \quad (4.2)$$

Sviluppando in $\Delta A, \Delta B$ (nel limite di grandi campioni) si ottiene

$$\text{var}(R_{est}) = \frac{\langle A \rangle^{2p}}{\langle B \rangle^{2q}} (p^2 \langle \Delta A^2 \rangle + q^2 \langle \Delta B^2 \rangle - 2pq \langle \Delta A \Delta B \rangle) + o(1/n) \quad (4.3)$$

dove l’ultimo termine tiene conto della correlazione fra \bar{A} e \bar{B} . Usando la disuguaglianza di Schwartz si può dare facilmente un limite superiore a $\text{var}(R_{est})$ che però risulta spesso troppo grande. Per evitare di calcolare la covarianza $\langle \Delta A \Delta B \rangle$ si può allora riscrivere la (4.3) come

$$\text{var}(R_{est}) = \frac{\langle A \rangle^{2p}}{\langle B \rangle^{2q}} \text{var}(p\Delta A - q\Delta B) \quad (4.4)$$

e questa ultima varianza può essere calcolata applicando il metodo usuale alla serie di misure

$$p \frac{A_i - \bar{A}}{\bar{A}} - q \frac{B_i - \bar{B}}{\bar{B}}. \quad (4.5)$$

d	N	n° misure	\mathcal{E}	$\tau_{int,\varepsilon}$
2	100	$7.217 \cdot 10^8$	15.9248 ± 0.00083	430.82 ± 0.41
	300	$8.958 \cdot 10^8$	48.0609 ± 0.0012	2798.1 ± 2.2
	1000	$1.725 \cdot 10^8$	160.4912 ± 0.0052	19612 ± 36
3	100	$7.262 \cdot 10^8$	19.1400 ± 0.0012	462.72 ± 0.52
	300	$7.342 \cdot 10^8$	59.0846 ± 0.0017	3017.9 ± 2.7
	1000	$1.300 \cdot 10^8$	198.9920 ± 0.0079	21477 ± 48

Tabella 4.3: Stime per l’energia e relativi tempi di autocorrelazione (l’errore è una deviazione standard).

d		R_g^2	R_e^2	R_m^2	\mathcal{E}
2	$\nu \pm \sigma_\nu \sqrt{\chi^2}$	0.7472 ± 0.0013	0.7472 ± 0.0012	0.7476 ± 0.0011	1.0028 ± 0.0014
	$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.1122 ± 0.0008	0.8006 ± 0.005	0.3501 ± 0.002	0.1575 ± 0.0013
	χ^2 (d.f.=1)	89.6	38.0	43.5	3208
3	$\nu \pm \sigma_\nu \sqrt{\chi^2}$	0.5944 ± 0.0009	0.5929 ± 0.0007	0.5946 ± 0.0010	1.0144 ± 0.0063
	$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.1758 ± 0.0001	1.127 ± 0.001	0.5284 ± 0.0005	0.1808 ± 0.0063
	χ^2 (d.f.=1)	122	50.5	161	44380

Tabella 4.4: Risultato dei fit per R_g^2 , R_e^2 , R_m^2 e \mathcal{E} (l’errore è stimato tenendo conto dell’elevato valore del χ^2).

Si ottengono così gli errori corretti (non sovrastimati). È importante evidenziare che la correlazione fra \bar{A} e \bar{B} non ha nessuna relazione col fatto che l’algoritmo è dinamico, ed anzi è importante tenerla in conto anche nel caso di campionamento indipendente. Nel nostro caso specifico $p = q = 1$ e di conseguenza oltre alla varianza dei raggi e dell’energia abbiamo calcolato quella dei tre osservabili della forma $\frac{A}{\langle A \rangle} - \frac{B}{\langle B \rangle}$ che si ottengono quando A e B sono raggi di tipo diverso.

In $d = 2$ esiste la relazione esatta (1.71) a pag. 16, che collega A_∞ e B_∞ agli esponenti critici ν e γ . Per questi ultimi i valori esatti $\nu = 3/4$ e $\gamma = 43/32$ danno $\lambda = 246/91 = 2.7033 \dots$. Dai valori in Tab. 4.2 si possono stimare i valori $\hat{\lambda}_N$ da confrontare, nel limite $N \rightarrow \infty$, con il valore teorico $\lambda = 2.7033 \dots$. Si ottiene $\hat{\lambda}_{100} = 2.6960 \pm 0.0007$, $\hat{\lambda}_{300} = 2.7023 \pm 0.0007$ e $\hat{\lambda}_{1000} = 2.7033 \pm 0.0023$; come si vede l’accordo è molto buono già per $N = 300$, per il quale le correzioni allo scaling sono certamente ancora rilevanti. Rispetto alle stime per l’esponente ν si vede quindi che la stima di λ è meno sensibile alle correzioni allo scaling. Questo si spiega facilmente osservando che (vedi Tab. 4.2) le correzioni allo scaling per A_N e per B_N hanno lo stesso segno. Dato che A_∞ e B_∞ compaiono con segno opposto nella (1.71), quando al loro posto sostituiamo A_N e B_N , le correzioni tendono compensarsi.

Abbiamo analizzato i dati in “pacchetti” di misure consecutive (ogni pacchetto contenente 10^6 , 2×10^6 o 3×10^6 misure di raggi) in modo tale da controllare la correttezza delle barre d’errore *a priori* (vedi pagina 33), calcolando la deviazione standard σ del valore medio dei pacchetti che deve coincidere approssimativamente con il valore predetto dalla formula (2.41), dove n è il numero di misure contenute in un singolo pacchetto. Riportiamo in tabella 4.5 i risultati per un sottinsieme delle misure totali, dove abbiamo considerato solo pacchetti della stessa dimensione.

Per l’inizializzazione dell’ algoritmo si sono usate configurazioni a “barra” scartando poi le misure effettuate nell’ intervallo di “termalizzazione” impiegato dalla catena di

Markov per raggiungere la distribuzione stazionaria di equilibrio. È quindi essenziale verificare che questo intervallo sia sufficientemente grande, perchè altrimenti i dati saranno afflitti da un severo errore sistematico. Una condizione che può essere usata per la scelta di questo intervallo è [22]

$$20 \tau_{exp} < n^o \text{ misure scartate} < \frac{n^o \text{ misure}}{4}. \quad (4.6)$$

A questo punto è stata controllata la correttezza della scelta fatta analizzando, nel caso $N = 1000$ (che costituisce ovviamente il test più severo), i valori medi dei raggi (dell'energia), che sono massimi (risp. minimi) per una barra dritta, in ogni pacchetto di misure consecutive: Un esame dei dati mostra immediatamente che le fluttuazioni nei valori del primo pacchetto sono dello stesso ordine di grandezza delle fluttuazioni statistiche nei valori dei pacchetti successivi.

Come si vede dalla (2.41), la varianza della stima di un' osservabile è controllata dal tempo integrato τ_{int} della funzione di autocorrelazione corrispondente (a meno del caso dei rapporti fra ampiezze, come visto precedentemente). L'errore su τ_{int} dipende dalla stima usata per esso. Nel nostro caso si è usato il metodo della finestra automatica (vedi pagina 35) e l'errore risulta (vedi (2.55))

$$\text{var}(\hat{\tau}_{int}) \approx \frac{2(2c\hat{\tau}_{int} + 1)}{n} \hat{\tau}_{int}^2 \quad (4.7)$$

dove n è il numero delle misure raccolte e dove si è scelto $c = 15$. Questo metodo dà buoni risultati nel caso in cui il decadimento di $\rho(t)$ sia quasi esponenziale, mentre, nel caso in cui ci sono delle code di piccola ampiezza nascoste nella zona ad elevato rumore, si rischia di sottostimare τ_{int} . Infatti il metodo non è sensibile a tali code che quindi vengono ignorate nel calcolo di τ_{int} . Si è riscontrato questo problema (anche se in misura minima, dato che la coda aveva un'ampiezza talmente piccola da apportare a τ_{int} una correzione complessiva del solo 5%) nello studio della funzione di autocorrelazione dell'energia. Per risolverlo si è pensato di calcolarla interamente fino ad un valore massimo $t_{max} \simeq w(\tau_{int} + k\sqrt{\text{var}(\tau_{int})})$ dove w e k sono scelti su basi empiriche (nel nostro caso

d	N	R_g^2		R_e^2		R_m^2		\mathcal{E}	
		EstErr	σ	EstErr	σ	EstErr	σ	EstErr	σ
2	100	0.132	0.117	1.40	1.24	0.474	0.399	0.0081	0.0084
	300	0.743	0.832	7.62	8.22	2.62	2.72	0.0115	0.0104
	1000	7.73	7.51	77.2	81.8	26.8	29.2	0.0249	0.0258
3	100	0.0575	0.0642	0.497	0.543	0.188	0.198	0.0115	0.0117
	300	0.217	0.213	1.82	1.84	0.700	0.669	0.0167	0.0171
	1000	1.58	1.65	12.9	12.2	5.00	4.87	0.0401	0.0432

Tabella 4.5: Errori stimati e deviazioni standard per il valore medio dei pacchetti di misure.

- In $d = 2$: $N = 100$, 66 pacchetti di 3×10^6 misure ciascuno per i raggi e 7.5×10^6 per l'energia; $N = 300$, 47 pacchetti di 3×10^6 misure ciascuno per i raggi e 9.99×10^6 per l'energia; $N = 1000$, 23 pacchetti di 10^6 misure ciascuno per i raggi e 7.5×10^6 per l'energia.
- In $d = 3$: $N = 100$, 91 pacchetti di 3×10^6 misure ciascuno per i raggi e 7.98×10^6 per l'energia; $N = 300$, 79 pacchetti di 3×10^6 ciascuno per i raggi e 7.98×10^6 per l'energia; $N = 1000$, 26 pacchetti di 10^6 misure ciascuno per i raggi e 5×10^6 per l'energia.

20 e 4 rispettivamente); si è inoltre calcolato il suo valore ad intervalli di tempo fissati di 15 unità fino ad un tempo massimo di circa $10t_{max}$. Tutto questo aggiornando le varie quantità (τ_{int} , $\text{var}(\tau_{int})$ e quindi t_{max}) al caricamento di ogni nuovo pacchetto di misure in modo da sfruttare così la diminuzione di $\text{var}(\tau_{int})$ all'aumentare delle misure analizzate per evitare di calcolare $\rho(t)$ per t troppo grandi (regione ad alto rumore). Si è quindi ricostruita la funzione di autocorrelazione interpolando linearmente nella zona $t_{max} \leq t \leq 10t_{max}$ e si è calcolato il valore corretto di τ_{int} che tenesse conto della presenza della coda.

Una volta calcolati i tempi integrati si è fatto un fit di τ_{int} con la funzione AN^z , utilizzando il metodo dei minimi quadrati per $\log(\tau_{int})$ vs $\log(N)$, pesato con gli errori stimati a priori dalla (4.7) e riportati nelle tabelle 4.3,4.6. I risultati sono mostrati nelle tabelle 4.7,4.8. Osservando il valore del χ^2 per A_N, B_N, C_N e per \mathcal{E} , è chiaro che ci sono correzioni rilevanti alla legge $\tau_{int} = AN^z$, in particolar modo per l'energia. In quest'ultimo caso, bisogna sottolineare che per il computo di $\tau_{int,\mathcal{E}}$ la coda è stata considerata solo fino a $t = 10t_{max}$. La restante parte, contribuirebbe, probabilmente, con correzioni inferiori a quelle già ottenute considerando la parte di coda nell'intervallo $t_{max} \leq t \leq 10t_{max}$ (in questo caso 5%), che però costituiscono un errore sistematico rilevante dati i piccoli errori statistici sui tempi ottenuti grazie all'elevatissima quantità di dati raccolti.

Errori più ragionevoli per i parametri dei fit si ottengono moltiplicando quelli originali per $\sqrt{\chi^2}$. Un'altra possibile interpretazione è quella di calcolare z con i soli primi due punti e poi con gli ultimi due, osservando se questi valori parziali crescono o diminuiscono al crescere delle lunghezze dei cammini. Per \mathcal{E} si ottiene rispettivamente $z_1 = 1.70$ e $z_2 = 1.62$ in $d = 2$, e $z_1 = 1.71$ e $z_2 = 1.63$ in $d = 3$; l'ultimo valore può essere quindi considerato un limite superiore per $z_{int,\mathcal{E}}$.

Per estrarre, dalle funzioni di autocorrelazione, informazioni sui tempi esponenziali, abbiamo provato a fare un fit di queste funzioni con la forma $Ae^{-\frac{t}{\tau}}$, dove le barre d'errore sono state stimate calcolando, a t fissato, la deviazione standard del valore medio di $\rho(t)$ in ogni pacchetto di misure. Esse risultano, entro le fluttuazioni statistiche, all'incirca indipendenti da t , eccetto che per i primi pochi punti delle funzioni dove si abbassano velocemente. I fit sono stati fatti con il metodo dei minimi quadrati per $\log(\rho(t))$ contro t , utilizzando solo i valori di $\rho(t)$ per $t > t_{min}$ dove t_{min} è dell'ordine di τ_{int} ed è stato incrementato a passi di un'unità per trovare un possibile valore limite dei parametri. Si sono incontrati però notevoli problemi (soprattutto per $N = 300, 1000$) per il fatto che la pendenza della curva $\log(\rho(t))$ varia per tempi piccoli e sembra raggiungere un limite solo nella zona dove le barre d'errore diventano grandi. Ma per t_{min} grande, la diminuzione

d	N	τ_{int,R_g^2}	τ_{int,R_e^2}	τ_{int,R_m^2}	τ_{int,A_N}^a	τ_{int,B_N}^a	τ_{int,C_N}^a
2	100	1556.8 ± 2.8	1104.6 ± 1.7	1062.2 ± 1.6	628.47 ± 0.72	522.48 ± 0.54	328.97 ± 0.27
	300	18000 ± 36	12125 ± 20	11882 ± 19	6717.6 ± 8.2	5584.6 ± 6.2	3565.8 ± 3.2
	1000	261440 ± 1760	168610 ± 910	167300 ± 900	92050 ± 370	76620 ± 280	49520 ± 150
3	100	1364.5 ± 2.6	880.8 ± 1.4	890.0 ± 1.4	392.86 ± 0.41	361.16 ± 0.36	238.66 ± 0.19
	300	13546 ± 26	8386 ± 13	8581 ± 13	3613.7 ± 3.6	3353.3 ± 3.2	2273.1 ± 1.8
	1000	166440 ± 1030	99580 ± 480	102530 ± 500	42170 ± 130	39320 ± 120	27300 ± 70

Tabella 4.6: Tempi integrati di autocorrelazione (l'errore è una deviazione standard).

^a τ_{int,A_N} indica il tempo di autocorrelazione per l'osservabile $\frac{R_g^2}{\langle R_g^2 \rangle} - \frac{R_e^2}{\langle R_e^2 \rangle}$, τ_{int,B_N} per l'osservabile $\frac{R_m^2}{\langle R_m^2 \rangle} - \frac{R_e^2}{\langle R_e^2 \rangle}$ e τ_{int,C_N} per l'osservabile $\frac{R_g^2}{\langle R_g^2 \rangle} - \frac{R_m^2}{\langle R_m^2 \rangle}$.

d		τ_{int,R_g^2}	τ_{int,R_e^2}	τ_{int,R_m^2}
2	z	2.227 ± 0.002	2.182 ± 0.002	2.198 ± 0.002
	A	0.0550 ± 0.0005	0.0478 ± 0.0004	0.0428 ± 0.0004
	χ^2 (d.f.=1)	0.660	1.04	0.054
3	z	2.088 ± 0.002	2.052 ± 0.002	2.062 ± 0.002
	A	0.0910 ± 0.0010	0.0693 ± 0.0006	0.0669 ± 0.0005
	χ^2 (d.f.=1)	0.804	0.625	0.191

Tabella 4.7: Risultato dei fit per i tempi integrati di R_g^2 , R_e^2 , R_m^2 .

d		τ_{int,A_N}	τ_{int,B_N}	τ_{int,C_N}	$\tau_{int,\varepsilon}$
2	$z \pm \sigma_z * \sqrt{\chi^2}$	2.160 ± 0.004	2.160 ± 0.005	2.173 ± 0.005	1.673 ± 0.040
	$A \pm \sigma_A * \sqrt{\chi^2}$	0.0300 ± 0.0009	0.0249 ± 0.0008	0.0148 ± 0.0008	0.196 ± 0.040
	χ^2 (d.f.=1)	18.6	25.2	28.8	1470
3	$z \pm \sigma_z * \sqrt{\chi^2}$	2.025 ± 0.006	2.032 ± 0.005	2.054 ± 0.005	1.681 ± 0.029
	$A \pm \sigma_A * \sqrt{\chi^2}$	0.0350 ± 0.0013	0.0311 ± 0.0010	0.0186 ± 0.0005	0.204 ± 0.029
	χ^2 (d.f.=1)	41.1	27.5	25.4	851

Tabella 4.8: Risultato dei fit per i tempi integrati di A_N , B_N , C_N e di ε (l'errore è stimato tenendo conto dell'elevato valore del χ^2).

d	N	τ_{exp,R_g^2}	τ_{exp,R_e^2}	τ_{exp,R_m^2}	$\tau_{exp,\varepsilon}$
2	100	1620 ± 10	1535 ± 10	1600 ± 7	1548 ± 20
	300	22000 ± 500	23500 ± 800	21700 ± 300	17910 ± 600
	1000	352500 ± 22500	429000 ± 22500	370500 ± 15000	226000 ± 12000
	b	2.36 ± 0.02	2.46 ± 0.02	2.37 ± 0.01	2.18 ± 0.02
	A	0.0307 ± 0.0024	0.0185 ± 0.0016	0.0291 ± 0.0015	0.0661 ± 0.0064
	χ^2 (d.f.=1)	1.12	0.93	0.16	2.76
3	100	1496 ± 20	1504 ± 15	1480 ± 15	1434 ± 30
	300	16160 ± 400	17200 ± 500	16400 ± 400	13860 ± 400
	1000	183500 ± 10000	188000 ± 10000	182000 ± 10000	152000 ± 6000
	b	2.10 ± 0.03	2.12 ± 0.04	2.11 ± 0.03	2.03 ± 0.03
	A	0.096 ± 0.016	0.088 ± 0.014	0.091 ± 0.015	0.124 ± 0.014
	χ^2 (d.f.=1)	1.44	2.1	1.12	1.45

Tabella 4.9: tempo esponenziale di autocorrelazione per R_g^2 , R_e^2 , R_m^2 , ε e relativo fit.

nel numero di punti e la crescita degli errori statistici, causano un'instabilità nelle curve dei parametri del fit e diventa quindi difficile stabilire i valori limite. Un esempio di questo comportamento è mostrato in fig.4.1.

Allo stesso tempo abbiamo provato a stimare il valore di τ_{exp} partendo dalla definizione

$$\tau_{exp} = \lim_{t \rightarrow \infty} -\frac{t}{\log(\rho(t))} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \tau(t). \quad (4.8)$$

Le difficoltà precedenti sono adesso più evidenti, a causa della presenza di $\rho(t)$ al denominatore. Abbiamo anche provato, per $\rho(t)$, una forma del tipo $\frac{A}{t^\alpha} e^{-\frac{t}{\tau}}$, ma l'esponente α , che dovrebbe essere indipendente dalle dimensioni del cammino, ha mostrato invece una grande instabilità, non evidenziando alcun comportamento di questo tipo nella zona accessibile ai nostri dati. I risultati per i tempi esponenziali e per il relativo esponente dinamico b (ottenuto nello stesso modo che per i tempi integrati) sono mostrati nelle tabelle 4.9,4.10

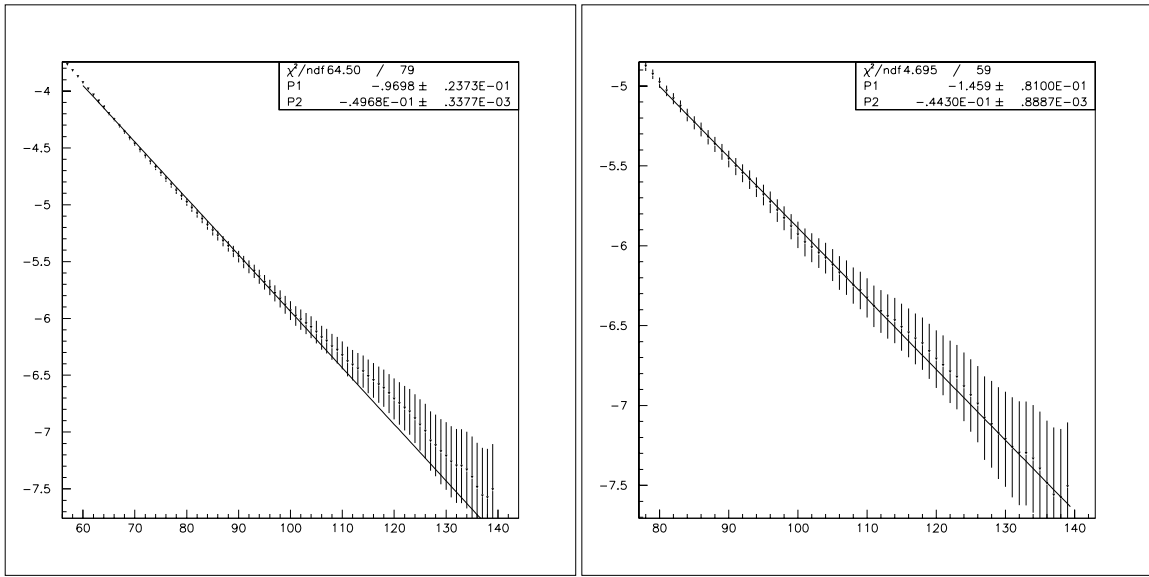


Figura 4.1: Fit della funzione di autocorrelazione della *distanza quadratica media fra gli estremi* per $N = 300$ con $t_{min}=60$ e $t_{min}=80$ (gli errori su $\rho(t)$ sono dell'ordine di 2.2×10^{-4}).

Analizziamo i risultati dei fit in $d = 2$. Nel caso di R_g^2, R_e^2, R_m^2 sembra che i tempi esponenziali abbiano un esponente critico leggermente superiore a quello dei tempi integrati; ma, a causa dell'incertezza incontrata nel ricavare i primi e delle correzioni allo scaling che certamente interessano le funzioni di correlazione, questa differenza non è molto chiara. Per A_N, B_N, C_N i fit effettuati per τ_{exp} sono migliori dei precedenti e gli esponenti dinamici sono molto vicini quelli di τ_{int} .

In $d = 3$ valgono, per R_g^2, R_e^2, R_m^2 , le stesse considerazioni che in $d = 2$, anche se in questo caso la differenza fra z_{exp} e di z_{int} è ancora più contenuta. Per quanto riguarda A_N, B_N, C_N , invece, i risultati dei fit sono peggiori che in $d = 2$: nei primi due casi, gli esponenti per τ_{exp} risultano addirittura inferiori di quelli per τ_{int} , mentre nel terzo si ha un brusco innalzamento di z_{exp} rispetto a z_{int} .

d	N	τ_{exp, A_N}	τ_{exp, B_N}	τ_{exp, C_N}	A_ε
2	100	1320 ± 10	1360 ± 10	1165 ± 15	0.142 ± 0.004
	300	14100 ± 100	14950 ± 100	12900 ± 100	0.063 ± 0.005
	1000	190500 ± 1500	198000 ± 1500	195000 ± 4000	0.032 ± 0.003
	b	2.159 ± 0.005	2.163 ± 0.005	2.21 ± 0.01	-0.67 ± 0.04
	A	0.0633 ± 0.0017	0.0647 ± 0.0017	0.0427 ± 0.0023	3.0 ± 0.6
	χ^2 (d.f.=1)	0.17	5.95	7.36	1.22
3	100	1128 ± 16	1144 ± 16	904 ± 24	0.163 ± 0.002
	300	10160 ± 200	10300 ± 200	10240 ± 200	0.101 ± 0.003
	1000	116000 ± 3000	109000 ± 3000	123000 ± 4000	0.071 ± 0.004
	b	2.01 ± 0.01	1.98 ± 0.01	2.14 ± 0.02	-0.39 ± 0.02
	A	0.107 ± 0.007	0.124 ± 0.008	0.049 ± 0.005	0.98 ± 0.09
	χ^2 (d.f.=1)	0.26	0.91	6.5	4.1

Tabella 4.10: tempo esponenziale di autocorrelazione per A_N, B_N, C_N e ampiezza della coda esponenziale dell'energia e relativo fit.

Infine, sia in due che in tre dimensioni, c'è una forte evidenza della differenza fra gli esponenti dinamici per \mathcal{E} .

Queste conclusioni sono supportate dall'analisi del comportamento di scaling delle funzioni di autocorrelazione. Infatti, come detto a pagina 34, ci si aspetta che $\rho(t; N)$ obbedisca alla legge di scaling dinamico

$$\rho(t; N) \approx |t|^{-a} F\left(\frac{|t|}{N^b}\right) \quad (4.9)$$

valida nel limite $N \rightarrow \infty$, $|t| \rightarrow \infty$, $x \equiv \frac{|t|}{N^b}$ fissato. Da questa, con opportune ipotesi su F , si ottiene

$$\tau_{exp} \sim N^b, \quad \tau_{int} \sim N^{(1-a)b} \quad (\text{se } a < 1), \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \rho(t; N) \sim |t|^{-a} \quad (4.10)$$

così che τ_{exp} e τ_{int} hanno differenti esponenti critici a meno che $a = 0$.

Abbiamo eseguito il grafico di $\log(|t|^a \rho_N(t))$ in funzione di $\frac{|t|}{N^b}$ ricercando valori di a, b che facciano sovrapporre le tre curve ($N = 100, 300, 1000$) contemporaneamente; alternativamente si possono rappresentare, sullo stesso grafico,

$$\frac{-t}{\log(\rho_{N_1}(t))} \text{ vs } t \quad \text{e} \quad \frac{-\frac{t}{w}}{-a \log\left(\frac{N_1^b}{N_2^b}\right) + \log(\rho_{N_2}(t))} \text{ vs } \frac{t}{w} \quad (4.11)$$

dove $w = u \frac{N_2^b}{N_1^b}$ e $u = \frac{\text{unità di tempo per } \rho_{N_1}(t)}{\text{unità di tempo per } \rho_{N_2}(t)}$.

I risultati ottenuti con questi due metodi sono consistenti fra di loro e sono stati riassunti in tabella 4.11, 4.12. Sia in $d = 2$ che in $d = 3$, essi mostrano per R_g^2 , R_e^2 , R_m^2 , A_N , B_N , C_N che l'esponente $b = z_{exp}$ dovrebbe essere uguale, a parte correzioni allo scaling, a z_{int} e ciò è confermato dal fatto che $a \approx 0$

In $d = 2$, come mostrato in fig. 4.2, sembrano esserci rilevanti correzioni allo scaling per R_g^2, R_e^2, R_m^2 , mentre queste non sono evidenti "a vista", almeno nella regione di tempi a noi accessibili, (vedi fig. 4.3) per A_N, B_N, C_N ; il comportamento delle funzioni $\tau(t)$ mostrato in fig. 4.2 spiega il fatto che i tempi esponenziali hanno esponenti critici effettivi differenti da quelli dei tempi integrati, i quali coincidono, grosso modo, con i valori di b ottenuti dall'analisi di scala. Infatti, il valore limite delle funzioni $\tau(t)$ riscalate, per $t \rightarrow \infty$, sembra diverso a seconda dell' N considerato (aumenta al crescere di N). Se tale valore limite fosse indipendente da N , l'esponente critico z_{exp} dovrebbe essere uguale a b , mentre questa crescita comporta che z_{exp} sia maggiore di b .

In $d = 3$ le correzioni allo scaling sembrano essere presenti, e di entità molto più lieve che in $d = 2$, solo per R_g^2 (vedi fig. 4.4) e questo si nota anche dal fatto che l'esponente critico effettivo dei tempi esponenziali ottenuto mediante fit sulle funzioni di autocorrelazione è più vicino, al corrispondente per i tempi integrati (e a b), di quanto non lo fosse in $d = 2$.

Per l'energia (vedi fig. 4.3) si ha un intervallo di valori, per i quali la sovrapposizione contemporanea delle tre curve è buona, più ampio che negli altri casi (in $d = 2$ da $b = 2.12$ e $a = 0.26$ fino a $b = 2.15$ e $a = 0.30$; in $d = 3$ da $b = 2.01$ e $a = 0.195$ fino a $b = 2.05$ e $a = 0.230$). Questi valori mostrano un discreto accordo fra le predizioni (4.10) per $z_{exp} (= b)$, $z_{int} (= (1 - a)b)$ ed i valori ottenuti dai fit (vedi tabelle 4.7, 4.8, 4.9, 4.10).

d		R_g^2	R_e^2	R_m^2	\mathcal{E}
2	b	2.21 ± 0.01	2.195 ± 0.010	2.22 ± 0.01	2.14 ± 0.02
	a	0.0010 ± 0.0007	0.012 ± 0.005	0.015 ± 0.005	0.285 ± 0.020
3	b	2.085 ± 0.010	2.068 ± 0.010	2.085 ± 0.010	2.030 ± 0.020
	a	0.0012 ± 0.0010	0.008 ± 0.003	0.011 ± 0.005	0.210 ± 0.020

Tabella 4.11: esponenti a, b per R_g^2 , R_e^2 , R_m^2 e \mathcal{E}

d		A_N	B_N	C_N
2	b	2.190 ± 0.010	2.185 ± 0.010	2.215 ± 0.010
	a	0.015 ± 0.005	0.013 ± 0.005	0.020 ± 0.005
3	b	2.060 ± 0.010	2.045 ± 0.010	2.100 ± 0.010
	a	0.020 ± 0.010	0.006 ± 0.005	0.030 ± 0.010

Tabella 4.12: esponenti a, b per A_N , B_N , C_N

Bisogna comunque sottolineare che gli effetti delle correzioni allo scaling che sembrano evidenti dai fit dei tempi integrati per A_N, B_N, C_N e \mathcal{E} sono probabilmente piccoli per essere rilevati in dal rescaling “a vista” delle funzioni $\tau(t)$ mentre, grazie all’ elevata statistica raccolta, sono grandi in confronto agli errori sulle stime dei tempi integrati.

Un’ altra conseguenza del fatto che $z_{int} \neq z_{exp}$ si osserva riscrivendo la legge di scaling dinamico (4.9) come

$$\rho(t; N) \approx |t|^{-a} F\left(\frac{|t|}{\tau_{exp}}\right) = \frac{1}{\tau_{exp}^a} \tilde{F}\left(\frac{|t|}{\tau_{exp}}\right) \quad (4.12)$$

Da questa, si ha subito

$$\frac{\rho(t; N)}{\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(t; N) dt} \approx \frac{\tilde{F}\left(\frac{|t|}{\tau_{exp}}\right)}{\tau_{exp}} \quad \text{ovvero} \quad \rho(t; N) \approx \frac{\tau_{int}}{\tau_{exp}} \tilde{F}\left(\frac{|t|}{\tau_{exp}}\right) \quad (4.13)$$

Per l’energia si è quindi controllato che la coda esponenziale di cui si è detto in precedenza (con tempo di decadimento molto superiore al tempo integrato) abbia un’ ampiezza che diminuisce all’ aumentare di N . Se $\tilde{F}(x)$ decade come un’ esponenziale per $|x| \rightarrow \infty$, l’ampiezza dovrebbe decadere con un esponente $c = z_{int} - z_{exp}$ per $N \rightarrow \infty$. Il risultato da noi ottenuto, con un fit esponenziale di $\rho_e(t)$, dà $c \approx -0.67$ in $d = 2$ e $c \approx -0.39$ in $d = 3$, che sono rozzamente in accordo con le previsioni basate sui valori sperimentali di z_{int} e di z_{exp} .

Per studiare l’ efficienza dell’ algoritmo è interessante la misura delle *frazioni di mosse effettivamente proposte* (EffProp), delle *frazioni di accettazione* (AccFrac) e delle *probabilità di occorrenza* per le configurazioni di tre passi successivi del cammino (le stime ottenute sono mostrate in Tab. 4.13, 4.14). Quest’ ultima quantità è stata misurata in $d = 3$ con il presente algoritmo mentre in $d = 2$ con l’ algoritmo Bilocal + Satyr. La frazione di mosse effettivamente proposte indica la frazione di iterazioni effettiva in cui viene proposto un cambiamento della configurazione del cammino. Essa è prevedibile a priori, in modo abbastanza preciso, una volta note le probabilità di occorrenza di tre link successivi (vedi pag. 65 per le previsioni riguardanti l’ algoritmo Satyr). Le frazioni di accettazione (per mosse effettivamente tentate), invece, non sono prevedibili a priori, ed indicano l’ efficacia effettiva dei vari tipi di mosse proposte, ovvero la probabilità che

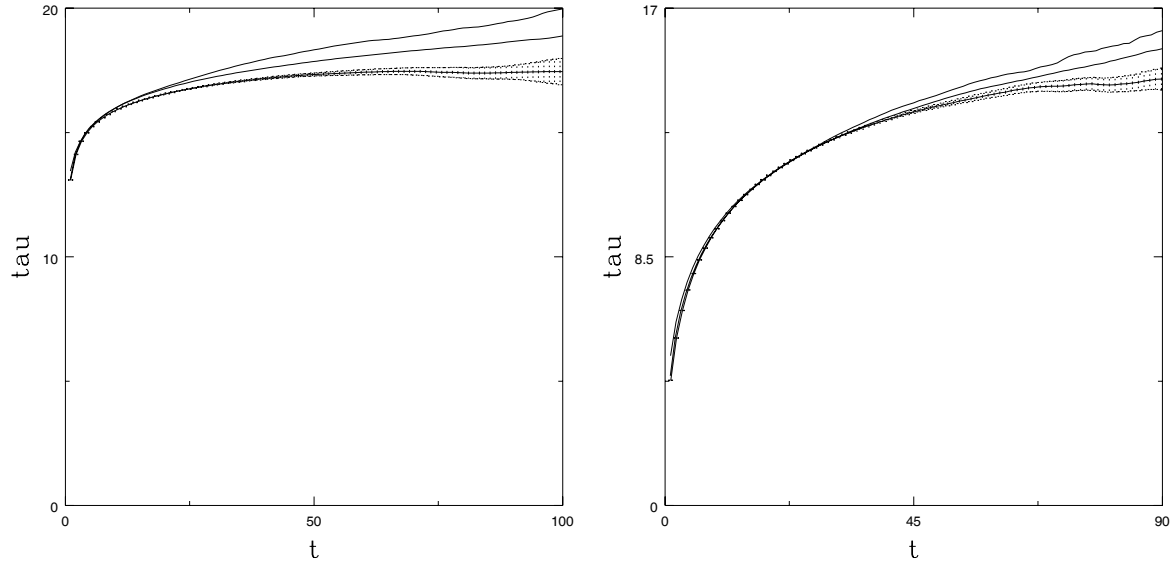


Figura 4.2: Algoritmo Bilocal + Reptation in $d = 2$: (a) Rescaling della funzione $\tau_{R_g^2}(t)$. (b) Rescaling della funzione $\tau_{R_e^2}(t)$. Gli errori sono rappresentati solo per $N=100$.

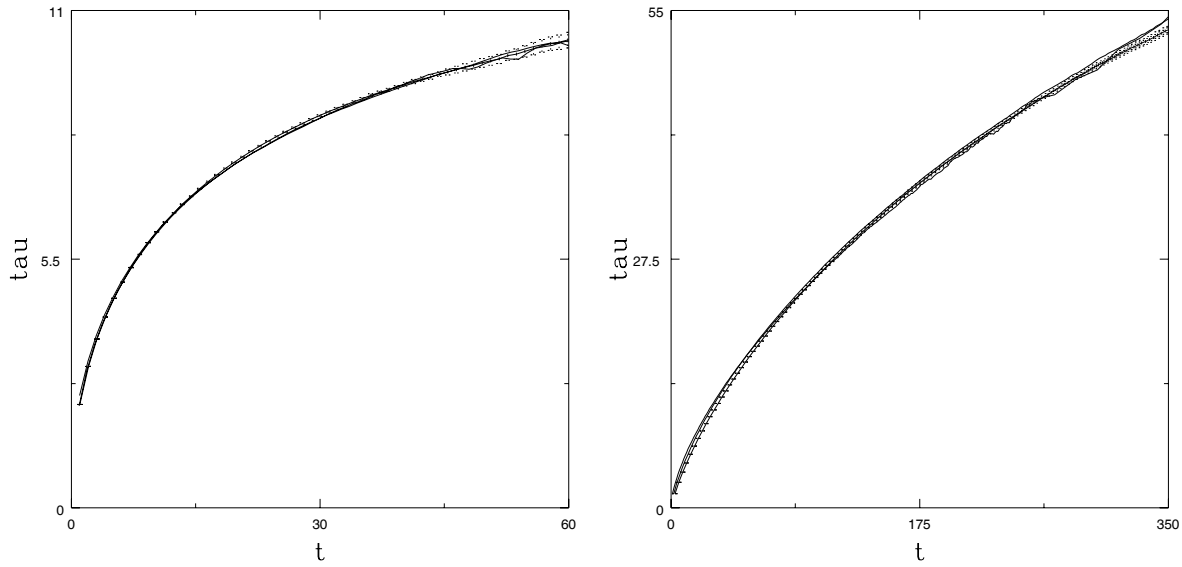


Figura 4.3: Algoritmo Bilocal + Reptation in $d = 2$: (a) Rescaling della funzione $\tau_{A_N}(t)$. (b) Rescaling della funzione $\tau_{\epsilon}(t)$. Gli errori sono rappresentati solo per $N=100$.

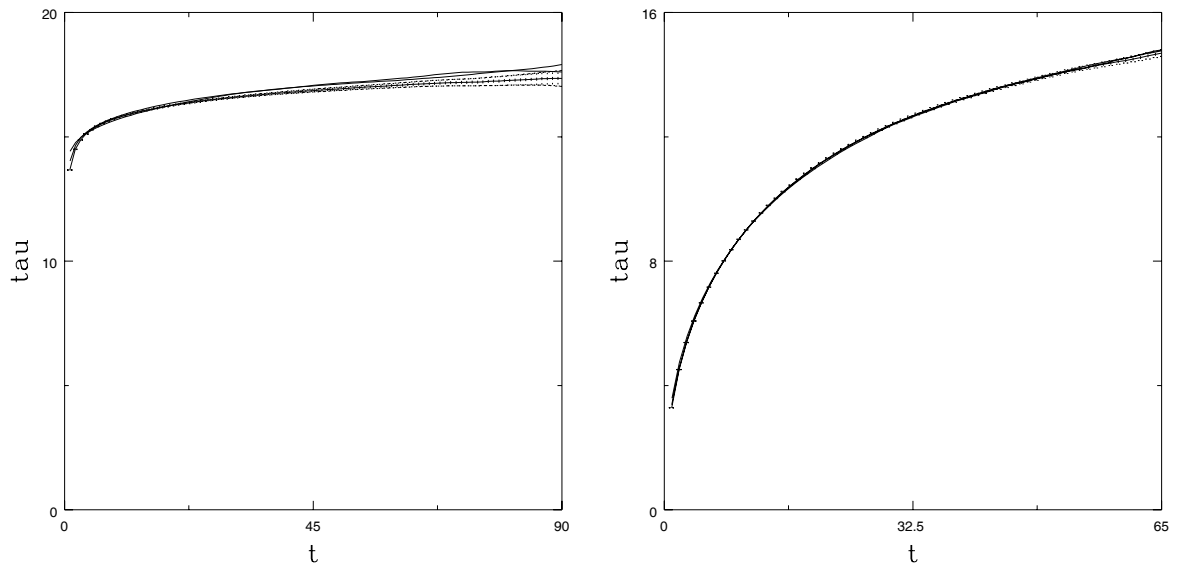


Figura 4.4: Algoritmo Bilocal + Reptation in $d = 3$: (a) Rescaling della funzione $\tau_{R_g^2}(t)$. (b) Rescaling della funzione $\tau_{R_m^2}(t)$. Gli errori sono rappresentati solo per $N=100$.

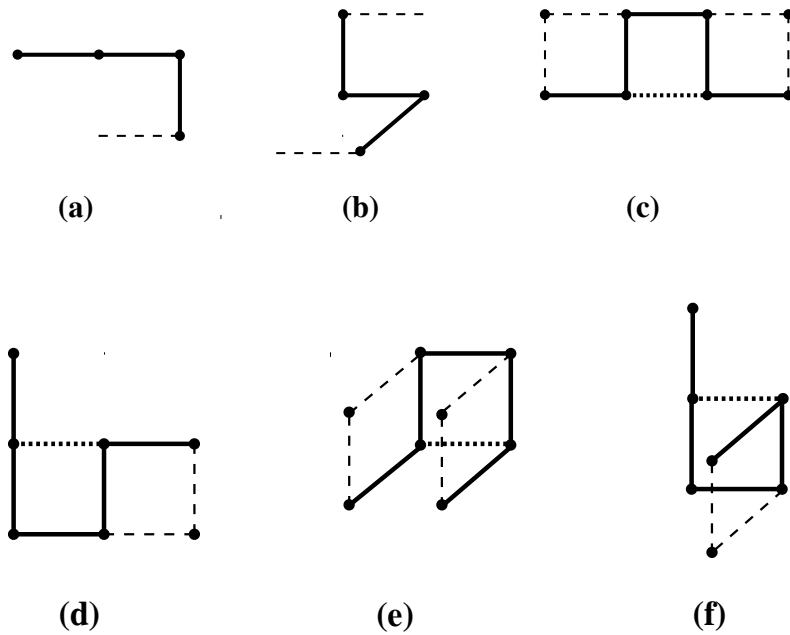


Figura 4.5: (a),(b): casi in cui una mossa (0) porta ad un'auto-intersezione. (c),(d),(e),(f): casi in cui una mossa (22) porta ad un'auto-intersezione. I links tratteggiati indicano le configurazioni che causano un'auto-intersezione. Nel caso di mosse (22) il link evidenziato dai puntini è quello su cui è stata aggiunta la kink.

d	N		P(0)	P(22)	Reptation
2	100	EffProp	0.4962806 ± 0.0000054	0.0952418 ± 0.0000044	1.0000000
		AccFrac	0.750521 ± 0.000020	0.851503 ± 0.000025	0.882404 ± 0.000033
	300	EffProp	0.4992701 ± 0.0000027	0.0962799 ± 0.0000023	1.0000000
		AccFrac	0.751160 ± 0.000020	0.851322 ± 0.000031	0.880396 ± 0.000046
	1000	EffProp	0.5003117 ± 0.0000024	0.0966542 ± 0.0000019	1.0000000
		AccFrac	0.751359 ± 0.000019	0.851281 ± 0.000043	0.879688 ± 0.000063
3	100	EffProp	0.4431918 ± 0.0000065	0.0850114 ± 0.0000050	1.0000000
		AccFrac	0.799684 ± 0.000022	0.881758 ± 0.000030	0.938307 ± 0.000038
	300	EffProp	0.4457480 ± 0.0000035	0.0863929 ± 0.0000029	1.0000000
		AccFrac	0.798294 ± 0.000021	0.878499 ± 0.000041	0.937301 ± 0.000052
	1000	EffProp	0.4466444 ± 0.0000028	0.0868631 ± 0.0000022	1.0000000
		AccFrac	0.797813 ± 0.000022	0.877211 ± 0.000050	0.936956 ± 0.000074

Tabella 4.13: Frazione di accettazione (AccFrac) e frazione di mosse effettivamente proposte (EffProp) per l’algoritmo Reptation.

queste superino il test di self-avoidance. È importante che quest’ ultima quantità non diminuisca eccessivamente all’aumentare di N perchè questo significherebbe un progressivo deterioramento dell’ efficienza dell’ algoritmo man mano che ci avvicina alla regione critica. Come si vede dalle tabelle, questa diminuzione è in tutti i casi talmente lieve da non destare alcuna preoccupazione. Riguardo all’ algoritmo Bilocal, è da notare, inoltre, come le frazioni di accettazione per le mosse (22) siano maggiori di quelle delle mosse (0). Intuitivamente ci si aspetterebbe il contrario dato che le seconde sono locali e muovono solamente un sito già presente nel cammino (vedi Fig. 2.1), mentre le prime ne inseriscono due nuovi sotto forma di U (vedi Fig. 2.4). Questo può essere spiegato come segue. Nei casi in cui è stata proposta una mossa (0), il contributo preponderante alla probabilità di auto-intersezione è dovuta al richiudersi, di uno dei due link consecutivi ai tre esaminati, a formare una configurazione ad U (vedi Fig. 4.5(a),(b)). Questo evento, ragionando su scala locale, ha una probabilità di circa $1/(2d-1)$. Nel caso di mossa (22) invece il contributo principale è dato dal richiudersi ad U, non di uno ma, di due link (vedi Fig. 4.5(c),(d),(e),(f)). La probabilità è quindi di circa $1/(2d-1)^2$, cioè molto più bassa (sia in $d=2$ che in $d=3$) di quella per le mosse di tipo (0).

Gli errori sulle frazioni sono stati assegnati calcolando la deviazione standard della media dei valori ottenuti dai singoli pacchetti di misure. Contrariamente a quanto ci si potrebbe aspettare, l’errore così calcolato non corrisponde a quello che si ottiene considerando il test di proponimento effettivo (risp. self-avoidance) come un evento indipendente con probabilità p_{EP} (risp. p_{SA}) di successo e $(1-p_{EP})$ (risp. $(1-p_{SA})$) di insuccesso. Infatti in questo caso l’errore si ricava banalmente usando la distribuzione binomiale. Prendendo come stima di p la quantità $\hat{p} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n_{succ}}{n}$, la formula per la varianza di una binomiale dà immediatamente $\text{var}(\hat{p}) \simeq \frac{1}{n^2} n \hat{p} (1 - \hat{p}) = \frac{\hat{p}(1-\hat{p})}{n}$. Questa formula dà però valori troppo piccoli rispetto a quelli calcolati nel primo (e sicuramente corretto) modo.

4.3 Bilocal più satyr in $d=2$

Quest’ algoritmo è stato testato in $d=2$ (reticolo quadrato) e, da subito, si è notato che esso è meno efficiente del precedente (a cui ci riferiremo nel seguito come “Reptation”) nella misura dei raggi e dei loro rapporti universali. Per questo motivo sono state eseguite

simulazioni con SAWs di lunghezze $N = 100, 300, 700$. Le tabelle 4.15, 4.16 mostrano le stime per le varie osservabili che sono in accordo con quelle ottenute con Reptation (in tab. 4.1, 4.2, 4.3) e con le stime dei lavori più precisi realizzati fino ad oggi (vedi ad esempio [11]).

Analogamente a quanto fatto per Reptation, si è controllata la correttezza degli errori assegnati *a priori* ed i risultati sono riportati in tabella 4.17.

I tempi integrati ed i relativi fit sono riportati nelle tabelle 4.16, 4.18. Come si vede dai valori del χ^2 ottenuti, le correzioni alla legge $\tau_{int} \simeq AN^{z_{int}}$ sembrano particolarmente grandi per C_N e soprattutto per l'energia \mathcal{E} .

Nello studio della funzione di autocorrelazione dell'energia si è incontrato nuovamente il problema della coda nascosta nella zona ad alto rumore. La sua ampiezza è adesso molto maggiore che nel caso di Reptation, e tale da apportare correzioni del 20% – 40% al tempo integrato. L'alta efficienza dell'algoritmo nella misura dell'energia (si confronti con Reptation) fa sì che il numero di misure di quest'osservabile sia molto più grande che per i raggi, permettendo così la stima delle funzioni di autocorrelazione fino al valore massimo $10t_{max}$ (vedi pag. 73) senza entrare nella zona dominata dal rumore (si veda per esempio Fig. 4.6(a)).

Si è poi effettuato un fit delle funzioni di autocorrelazione usando una funzione della forma $Ae^{-\frac{t}{\tau}}$, assegnando le barre d'errore in modo analogo al caso di Reptation (vedi pag. 73). Per i raggi ed i rapporti universali si sono incontrati gli stessi problemi già evidenziati a pag. 73; i risultati sono riportati, insieme a quelli del fit di τ_{exp} con la funzione AN^b , in tabella 4.19. In quanto alla funzione di autocorrelazione dell'energia, i fit con una forma esponenziale non hanno dato nessun risultato soddisfacente, neanche prendendo in esame solo la parte della coda per t molto elevati, e si è quindi ricorsi ad una forma del tipo $\frac{A}{t^\alpha}e^{-\frac{t}{\tau}}$. In questo caso si riesce a prendere in esame anche una regione intermedia, ottenendo un valore per α di circa 1.08 – 1.15 grosso modo indipendente dalla lunghezza del cammino, e dei tempi esponenziali molto più grandi dei tempi su cui è stata calcolata la funzione. In questa regione, il comportamento di $\rho_\epsilon(t)$ è quindi controllato dalla potenza $\frac{A}{t^\alpha}$. Un'altra evidenza di questo fatto si ha dall'analisi del rescaling delle funzioni di autocorrelazione. In Fig. 4.7 sono state riscalate le $\rho_\epsilon(t)$ per $N = 100, 300, 700$ come spiegato nella (4.11). Prima di tutto si noti che l'andamento di queste funzioni per grandi t è pressochè lineare. Questo sta ovviamente a significare che, con la statistica a disposizione, non si è ancora giunti al regime asintotico. In questo regime intermedio

$d = 2$	100	300	700
I	0.1542818 ± 0.0000029	0.1519123 ± 0.0000018	0.1512281 ± 0.0000012
L	0.4833045 ± 0.0000027	0.4807156 ± 0.0000017	0.4799793 ± 0.0000011
U	0.1077834 ± 0.0000026	0.1084602 ± 0.0000016	0.1086624 ± 0.0000012
S	0.2546302 ± 0.0000027	0.2589118 ± 0.0000018	0.2601303 ± 0.0000016
$d = 3$	100	300	1000
I	0.0533667 ± 0.0000068	0.0516549 ± 0.0000028	0.0510661 ± 0.0000023
L	0.3611736 ± 0.0000062	0.3557016 ± 0.0000025	0.3537907 ± 0.0000021
U	0.1012585 ± 0.0000056	0.1018716 ± 0.0000024	0.1020728 ± 0.0000023
S	0.4842012 ± 0.0000064	0.4907718 ± 0.0000036	0.4930704 ± 0.0000031

Tabella 4.14: probabilità di occorrenza per le configurazioni di tre passi successivi del cammino, misurate in $d = 2$ con l'algoritmo Satyr ed in $d = 3$ con l'algoritmo Reptation.

N	n° misure	$\langle R_g^2 \rangle_N$	$\langle R_e^2 \rangle_N$	$\langle R_m^2 \rangle_N$
100	$1.500 \cdot 10^8$	109.376 ± 0.015	780.414 ± 0.215	342.572 ± 0.085
300	$2.205 \cdot 10^7$	564.397 ± 0.188	4026.45 ± 2.74	1769.49 ± 1.13
700	$4.130 \cdot 10^6$	2008.07 ± 1.57	14325.6 ± 22.8	6296.90 ± 9.73
N	n° misure	A_N	B_N	C_N
100	$1.500 \cdot 10^8$	0.140152 ± 0.000021	0.438962 ± 0.000031	0.319279 ± 0.000045
300	$2.205 \cdot 10^7$	0.140172 ± 0.000053	0.439467 ± 0.000075	0.318959 ± 0.000118
700	$4.130 \cdot 10^6$	0.14017 ± 0.00012	0.43956 ± 0.00017	0.31890 ± 0.00028

Tabella 4.15: Stime per le misure “classiche” della *dimensione* di un SAW e per i rapporti universali fra ampiezze (l’errore è una deviazione standard).

N	n° misure	\mathcal{E}	$\tau_{int,\varepsilon}$	fit $\tau_{int,\varepsilon}$	
100	$3.999 \cdot 10^9$	15.9231 ± 0.00040	423.75 ± 0.20	$z \pm \sigma_z \sqrt{\chi^2}$	1.233 ± 0.023
300	$2.205 \cdot 10^9$	48.0603 ± 0.00074	1701.3 ± 0.82	$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	1.46 ± 0.19
700	$1.860 \cdot 10^9$	112.3048 ± 0.00129	4634.5 ± 2.55	χ^2 (d.f.=1)	4197

Tabella 4.16: Stime per l’energia e relativi tempi integrati di autocorrelazione (l’errore è una deviazione standard).

N	R_g^2		R_e^2		R_m^2		\mathcal{E}	
	EstErr	σ	EstErr	σ	EstErr	σ	EstErr	σ
100	0.127	0.143	1.86	2.10	0.738	0.848	0.00350	0.00329
300	1.77	1.90	25.8	24.5	10.6	10.3	0.00694	0.00690
700	14.2	15.9	207	230	88.1	101.6	0.0117	0.0136

Tabella 4.17: Errori stimati e deviazioni standard per il valore medio dei pacchetti di misure: N=100, 60 pacchetti di 2×10^6 misure ciascuno per i raggi e 5.332×10^7 per l’energia; N=300, 76 pacchetti di 2.5×10^5 ciascuno per i raggi e 2.5×10^7 per l’energia; N=700, 65 pacchetti di 5×10^4 misure ciascuno per i raggi e 2.25×10^7 per l’energia.

N	τ_{int,R_g^2}	τ_{int,R_e^2}	τ_{int,R_m^2}
100	7816 ± 15	10487 ± 24	13764 ± 36
300	170516 ± 820	231366 ± 1300	324260 ± 2150
700	1953225 ± 21900	2662402 ± 34900	3971227 ± 63600
$z \pm \sigma_z \sqrt{\chi^2}$	2.82 ± 0.02	2.83 ± 0.015	2.89 ± 0.02
$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.0180 ± 0.0014	0.0232 ± 0.0017	0.0229 ± 0.0020
χ^2 (d.f.=1)	18.5	11.8	11.8
N	τ_{int,A_N}^a	τ_{int,B_N}^a	τ_{int,C_N}^a
100	8683 ± 18	2508.2 ± 2.8	11696 ± 28
300	193706 ± 990	48666 ± 130	293326 ± 1850
700	2189880 ± 26000	530077 ± 3100	3575070 ± 54300
$z \pm \sigma_z \sqrt{\chi^2}$	2.83 ± 0.01	2.72 ± 0.03	2.936 ± 0.005
$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.0188 ± 0.0007	0.0091 ± 0.0012	0.0157 ± 0.0004
χ^2 (d.f.=1)	4.13	182	0.66

Tabella 4.18: Tempi integrati di autocorrelazione e relativo fit (l’errore è una deviazione standard).

^a τ_{int,A_N} indica il tempo di autocorrelazione per l’osservabile $\frac{R_g^2}{\langle R_g^2 \rangle} - \frac{R_e^2}{\langle R_e^2 \rangle}$, τ_{int,B_N} per l’osservabile $\frac{R_m^2}{\langle R_m^2 \rangle} - \frac{R_g^2}{\langle R_g^2 \rangle}$ e τ_{int,C_N} per l’osservabile $\frac{R_m^2}{\langle R_m^2 \rangle} - \frac{R_e^2}{\langle R_e^2 \rangle}$.

$\rho_{\mathcal{E}}(t)$ deve avere un andamento del tipo $\approx \frac{A}{t^\alpha}$ di modo che

$$\tau(t)_{\mathcal{E}} \equiv -\frac{t}{\log \rho_{\mathcal{E}}(t)} \approx -\frac{t}{\log A - \alpha \log(t)}, \quad (4.14)$$

e quindi, abbastanza vicino ad una retta. In secondo luogo, mentre nel caso dei raggi e dei rapporti universali si ha un piccolo intervallo di valori di a e di b che permettono la sovrapposizione simultanea delle tre curve (che viene utilizzato per dare un errore a questi due parametri), nel caso di \mathcal{E} , invece, tale sovrapposizione avviene addirittura per una curva nello spazio dei parametri a e b (da $b \approx 2.95$ e $a \approx 0.68$ fino a $b \approx 1.7$ e $a \approx 0.2$). Ciò sta a significare che, nella regione in oggetto, $\rho_{\mathcal{E}}(t) = |t|^{-a} F\left(\frac{|t|}{N^b}\right)$ dipende da un solo parametro. Una forma che soddisfa questa condizione è appunto del tipo $\frac{A}{t^\alpha}$. Siamo così giunti in vari modi alla stessa conclusione, che spiega l'impossibilità di ottenere, dal fit di $\rho_{\mathcal{E}}(t)$, valori sensati per i tempi esponenziali. Questo sarebbe possibile solo con una statistica molto più elevata, che permettesse di raggiungere la regione asintotica in cui $\rho_{\mathcal{E}}(t)$ decade esponenzialmente, mantenendo il rumore sufficientemente basso in modo da poter effettuare dei fit su di essa.

Per quanto riguarda le altre osservabili, il rescaling conferma i valori di b ottenuti con i fit dei tempi esponenziali (vedi tab. 4.19), e nel solo caso di B_N si ha una piccola discrepanza imputabile alle correzioni allo scaling che, come già detto in precedenza e come evidente in figura 4.7, sembrano essere presenti nelle corrispondenti funzioni di autocorrelazione. Il fatto che i valori di b siano abbastanza vicini a quelli di z_{int} e che

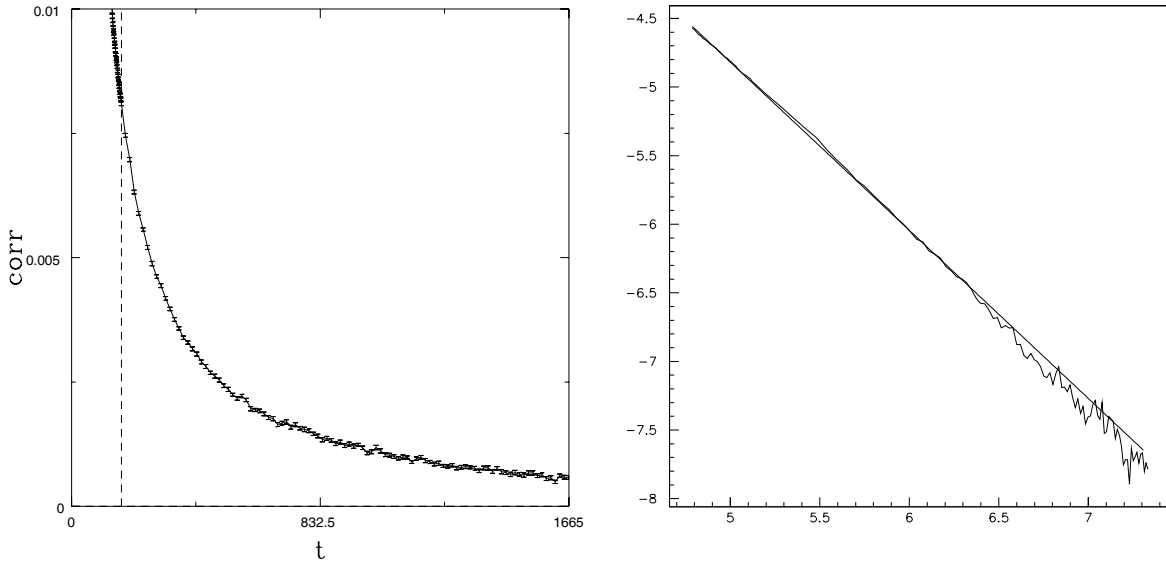


Figura 4.6: (a) Coda della funzione di autocorrelazione dell' energia per $N = 700$. La linea verticale indica t_{max} fino al quale la funzione viene calcolata a passi di un unità; da lì in poi i passi vengono portati a 15 unità. La scala dei tempi corrisponde ad un tempo integrato di 6.497 se calcolato fino a t_{max} , e di 9.269 se calcolato fino a $10t_{max}$ con interpolazione lineare per congiungere i punti della coda. (b) fit lineare, in scala bilogarithmica e per tempi grandi, della funzione di autocorrelazione dell' energia a $N = 300$

N	τ_{exp,R_g^2}	τ_{exp,R_e^2}	τ_{exp,R_m^2}
100	18800 ± 80	19000 ± 80	19310 ± 50
300	459000 ± 4000	479000 ± 4000	486000 ± 4000
700	5737500 ± 157500	5805000 ± 157500	5625000 ± 112500
b	2.92 ± 0.01	2.94 ± 0.01	2.93 ± 0.01
A	0.027 ± 0.001	0.025 ± 0.001	0.027 ± 0.001
χ^2 (d.f.=1)	3.77	0.034	2.46
N	τ_{exp,A_N}	τ_{exp,B_N}	τ_{exp,C_N}
100	19070 ± 64	10240 ± 800	19520 ± 160
300	487000 ± 4000	210000 ± 20000	494000 ± 4000
700	5985000 ± 112500	2115000 ± 225000	5850000 ± 112500
b	2.95 ± 0.01	2.74 ± 0.07	2.94 ± 0.01
A	0.024 ± 0.001	0.034 ± 0.012	0.026 ± 0.001
χ^2 (d.f.=1)	0.17	0.01	0.67

Tabella 4.19: Tempi esponenziali di autocorrelazione e relativi fit.

	R_g^2	R_e^2	R_m^2	\mathcal{E}
b	2.875 ± 0.025	2.92 ± 0.02	2.92 ± 0.02	2.920 ± 0.040
a	0.018 ± 0.08	0.035 ± 0.010	0.010 ± 0.005	0.670 ± 0.015
	A_N	B_N	C_N	
b	2.937 ± 0.015	2.87 ± 0.04	2.95 ± 0.015	
a	0.035 ± 0.010	0.060 ± 0.020	0.0001 ± 0.0001	

Tabella 4.20: esponenti a, b

$a \approx 0$ suggerisce che nel limite asintotico i due esponenti critici diventino uguali ed a sia 0.

Da quanto visto fino ad ora ci si attende che il tempo esponenziale di $\rho_{\mathcal{E}}(t)$ sia molto più grande dei tempi per i quali essa è stata calcolata. È logico aspettarsi che esso sia dello stesso ordine di grandezza degli analoghi per i raggi, e che abbia un esponente critico vicino ai loro. In questo modo, nel rescaling delle funzioni di autocorrelazione, si fissa il valore di $b \approx 2.92$ e si determina il corrispondente valore di a che risulta dell'ordine di 0.67. La (4.10) predice quindi per l'esponente critico del tempo integrato $z_{int,\mathcal{E}} = (1-a)b \approx 1$.

Facendo un fit di $\rho_{\mathcal{E}}(t)$ con la funzione A/t^α (vedi fig. 4.6(b) in scala bilogaritmica) si ottiene $\alpha \approx 1 - 1.3$, dove α decresce all'aumentare di N . A causa di questo decadimento lento nella regione dove $t < \tau_{exp}$, il metodo usato per calcolare $\rho_{\mathcal{E}}(t)$, che si ferma ad un valore $t = 10t_{max}$ (vedi pag. 73), può non essere sufficiente ad evitare sottostime di τ_{int} . Infatti se, come nel nostro caso, $10t_{max}$ è considerevolmente più piccolo di τ_{exp} , la parte di coda tralasciata potrebbe dare un contributo non trascurabile a τ_{int} . Per stimare questo errore sistematico si può usare il metodo di Li *et al.* [11] (vedi pag. 36) dove, nel nostro caso, M corrisponde a $10t_{max}$ (cioè all'estremo superiore della somma che dà il tempo integrato) e τ_{exp} è dello stesso ordine di grandezza del tempo esponenziale dei raggi. Nel caso $N = 100$, M è un po' più grande di τ_{exp} , e di conseguenza non si può prevedere un eventuale errore sistematico. Per $N = 300$, $\tau_{exp} \approx 1.5M$ e la correzione a τ_{int} risulta del 2.5% (2.4% nel caso che si approssimi $\rho_{\mathcal{E}}(t) \simeq A/t^{\approx 1.3}$ come ottenuto dai fit). Per $N = 700$, $\tau_{exp} \approx 7M$ e la correzione a τ_{int} risulta del 20.3% (18.1% nel caso in cui si approssimi $\rho_{\mathcal{E}}(t) \simeq A/t^{\approx 1.1}$ come ottenuto dai fit). Come si vede, all'aumentare di N la coda apporta un contributo sempre più rilevante dato che il tempo esponenziale cresce più velocemente di quello integrato. Già per $N = 700$ l'errore sistematico che deriverebbe

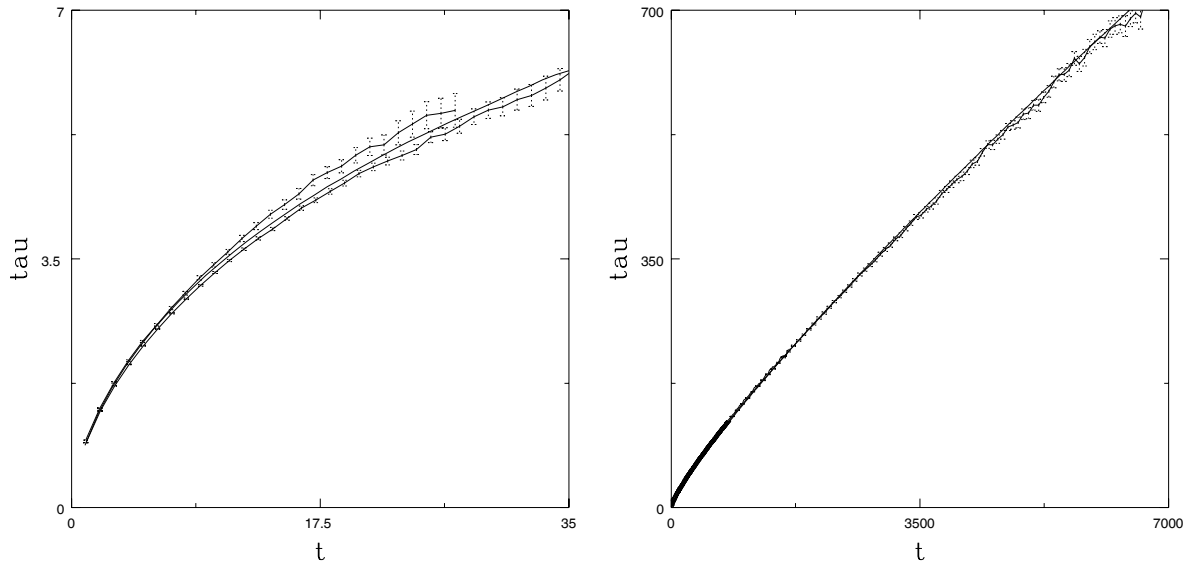


Figura 4.7: Algoritmo Bilocal + Satyr in $d = 2$: (a) Rescaling della funzione $\tau_{CN}(t)$ (gli errori sono rappresentati sia per $N = 300$ che per $N = 700$). (b) Rescaling della funzione $\tau_{\epsilon}(t)$ (errori solo per $N = 300$).

N		P(0)	P(22)	Satyr
100	EffProp	0.4962825 ± 0.0000028	0.0952369 ± 0.0000021	0.1713636 ± 0.0000021
	AccFrac	0.7505358 ± 0.0000094	0.851533 ± 0.000013	0.815141 ± 0.000016
300	EffProp	0.4992690 ± 0.0000018	0.0962812 ± 0.0000014	0.1703793 ± 0.0000014
	AccFrac	0.751160 ± 0.000010	0.851327 ± 0.000018	0.811996 ± 0.000024
700	EffProp	0.5001205 ± 0.0000015	0.0965829 ± 0.0000012	0.1701094 ± 0.0000011
	AccFrac	0.751330 ± 0.000012	0.851296 ± 0.000026	0.811103 ± 0.000039

Tabella 4.21: Frazione di accettazione (AccFrac e frazione di mosse effettivamente proposte (EffProp) per l'algoritmo Satyr.

dal trascurare la coda è molto elevato. A questo punto si rende necessaria una correzione dei tempi integrati in tabella 4.16 e dell'esponente critico che si ottiene dal relativo fit. Si ottiene così $\tau_{int,300} = 1742$ e $\tau_{int,700} = 5474$ ed il fit dà un esponente $z_{int,\epsilon} \simeq 1.31$ con χ^2 ancora molto alto. Contrariamente a quanto fatto per Reptation, non è possibile determinare adesso se lo $z_{int,\epsilon}$ effettivo aumenti o decresca al crescere di N : l'apporto o meno delle correzioni (che comunque sono solo approssimate) inverte questa tendenza.

In tabella 4.21 sono riportate le stime per le frazioni di mosse effettivamente proposte (EffProp) e per le frazioni di accettazione (AccFrac). Come si vede, il valore di EffProp per $N = 300$ concorda con il calcolo effettuato a pagina 65, dove si sono usati i valori delle probabilità di occorrenza di tre link consecutivi misurati su questa lunghezza. Inoltre, i valori delle frazioni per le mosse (0) e (22) sono pienamente in accordo con quelli ottenuti mediante l'algoritmo Bilocal + Reptation in $d = 2$ e riportati in Tab. 4.13. Facendo un confronto fra queste due tabelle si nota immediatamente che le frazioni di mosse accettate dal test di self-avoidance e soprattutto le frazioni di mosse effettivamente tentate hanno valori nettamente superiori nel caso di Reptation. Questo spiega immediatamente perchè i tempi di autocorrelazione del Satyr siano molto più grandi di quelli di Reptation,

anche se, tale motivo non è sufficiente a giustificare la forte crescita degli esponenti dinamici per i tempi di autocorrelazione dei raggi e dei loro rapporti, che causa un notevole deterioramento dell'efficienza rispetto al caso di Reptation.

Capitolo 5

Polimeri al punto critico θ in due dimensioni

Quando la temperatura di una soluzione di polimeri diminuisce, le forze attrattive a lungo range diventano più efficienti delle forze repulsive di contatto “hard-core”. Flory, nel 1942, scoprì che ad una temperatura T_F queste interazioni si compensavano, e che al di sotto di questa temperatura la soluzione si separava in due fasi. In soluzioni diluite questa separazione è preceduta da un cambiamento nella forma dei polimeri, che diventa più compatta: questa è la transizione catena-globulo.

Nel 1975 de Gennes [32] scoprì che una soluzione di polimeri alla temperatura T_F poteva essere considerata come un sistema tricritico (θ -point) a cui si sarebbe potuta applicare la teoria della rinormalizzazione. Il diagramma di fase di un tale sistema è costituito da un punto critico situato all’intersezione di una linea di punti di transizione di fase del primo ordine con una di punti del second’ordine. Questi ultimi giacciono sulla superficie critica di un punto fisso ordinario che ne governa il comportamento (nel caso dei polimeri esso è il punto fisso di alta temperatura, alla cui classe di universalità appartiene il SAW). I punti di transizione del primo ordine appartengono invece alla superficie critica di un punto fisso “di discontinuità”, caratterizzato dal fatto che l’autovalore $y = 1/\nu$ della variabile rilevante è uguale a d . Nel caso dei polimeri la transizione del primo ordine corrisponde alla separazione in due fasi della soluzione e la sommità della curva che descrive la coesistenza delle fasi costituisce un punto critico; nel limite di catene molto lunghe esso può essere identificato con il punto tricritico.

Per tenere in conto l’interazione attrattiva si potrebbe pensare di utilizzare un peso statistico uguale a quello utilizzato per l’effetto di volume escluso ma con accoppiamento di segno opposto, ovvero sia (nel limite continuo)

$$W = \exp \left[-\frac{1}{4} \int_0^S ds \left(\frac{d\mathbf{r}}{ds} \right)^2 - \frac{b}{6} \int_0^S ds' \int_0^S ds'' \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')) \right], \text{ con } b < 0. \quad (5.1)$$

Si dimostra però facilmente che in questo caso l’interazione fa collassare la catena in un punto (nel caso discreto ad un link).

Un altro possibile approccio è quello di scegliere un modello con un’interazione a due corpi somma di una parte repulsiva a corto range e di una parte attrattiva a lungo range. Alla temperatura T_F le due parti si compensano (in media) e sotto T_F la parte attrattiva domina e le catene collassano assumendo la forma di un globulo sferico in cui

il volume è proporzionale al numero di N link (fenomeno della saturazione nel quale $\nu = \frac{1}{d}$). Proviamo quindi ad utilizzare un peso statistico della forma

$$W = \exp \left[-\frac{1}{4} \int_0^S ds \left(\frac{d\mathbf{r}}{ds} \right)^2 - \frac{b_0}{6} \int_0^S ds' \int_0^S ds'' \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')) - \frac{b_1}{6} \int_0^S ds' \int_0^S ds'' |\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')|^{-\alpha} \right], \text{ con } b_0 > 0, \alpha > 0 \quad (5.2)$$

e b_1 di segno qualsiasi. Nell'espansione in potenze dell'interazione appaiono due costanti adimensionali

$$\begin{aligned} z_0 &\propto b_0 S^{2-d/2}, \\ z_1 &\propto b_1 S^{2-\alpha/2}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Il valore di α non è completamente arbitrario: richiediamo infatti che il range delle forze attrattive ($b_1 < 0$) sia finito, cioè $\int_{r>l} d^d r^{-\alpha} < \infty$; questo implica $\alpha < d$. In più per assicurare che la forza attrattiva sia efficiente per catene lunghe (e cioè che z_1 non tenda a zero per $S \rightarrow \infty$), si deve avere $2 - \alpha/2 > 0$. Entrambe le condizioni insieme danno $4 \geq \alpha > d$. In principio tale modello sarebbe valido se le forze fra i polimeri soddisfacessero questa condizione. In realtà le forze a più lungo range sono quelle di Van der Waals per le quali $\alpha = 6$. Si vede quindi che in questo caso $z_1 \rightarrow 0$ quando $S \rightarrow \infty$. In pratica è come se le forze attrattive si comportassero da forze a corto range, trascurabili però rispetto a quelle repulsive (si ricordi che $z_0 \rightarrow \infty$ per $S \rightarrow \infty$ per $d < 4$), ritornando al modello di sole forze repulsive o sole forze attrattive già scartato in precedenza.

Il modo per risolvere questa difficoltà è quello di introdurre un'interazione a tre corpi oltre a quella a due. Assumendo come fisicamente presente solo l'interazione a due corpi, quella a tre appare non appena si esegue un numero finito di trasformazioni di gruppo di rinormalizzazione (ad esempio col metodo della decimazione), insieme con interazioni a quattro e più corpi, che sono però irrilevanti in $d = 3$. Il peso statistico che descrive il nostro modello sarà quindi

$$W = \exp \left[-\frac{1}{4} \int_0^S ds \left(\frac{d\mathbf{r}}{ds} \right)^2 - \frac{b}{6} \int_0^S ds' \int_0^S ds'' \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')) - \frac{c}{24} \int_0^S ds' \int_0^S ds'' \int_0^S ds''' \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s'')) \delta(\mathbf{r}(s') - \mathbf{r}(s''')) \right], \quad (5.4)$$

con $c > 0$. La positività di c assicura la stabilità del sistema e ovvero che il peso statistico è ben definito. I due parametri adimensionali sono adesso

$$\begin{aligned} z &= b S^{2-d/2} (2\pi)^{-d/2}, \\ y &= c S^{3-d} (2\pi)^{-d}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Come si vede, per $d = 3$, y rimane finita quando $S \rightarrow \infty$ e quindi l'interazione a tre corpi è marginale in tre dimensioni. Per definire il modello più precisamente è necessario introdurre un cut-off s_0 sulle corte distanze, e considerare c costante mentre b dipendente in modo lineare dalla temperatura. b e c dipendono dai parametri microscopici del sistema in modo complicato e devono quindi essere determinati in modo fenomenologico.

Il modo più semplice e “fisico” per definire T_F e quello di chiamare $T_{VF}(S)$ la temperatura alla quale il secondo coefficiente del viriale¹, per una catena di lunghezza S , diventa uguale a zero porre $T_F = \lim_{S \rightarrow \infty} T_{VF}(S)$. È possibile dimostrare formalmente, nel limite continuo, che per qualsiasi tipo di interazione (quindi anche a più di tre corpi) la teoria lagrangiana per i polimeri è completamente equivalente a quella di un campo classico ad n componenti, prolungata analiticamente ad $n = 0$. Si possono quindi applicare tutte le tecniche di teoria dei campi (tra cui il gruppo di rinormalizzazione) ottenendo, modulo una trasformata di Laplace, tutte le grandezze interessanti per la teoria dei polimeri. Per $d < 3$ altri tipi di interazione diventano rilevanti. Considerando un’interazione a p corpi del tipo

$$b_p \int_0^S ds_1 \dots \int_0^S ds_p \delta(\mathbf{r}(s_1) - \mathbf{r}(s_2)) \dots \delta(\mathbf{r}(s_1) - \mathbf{r}(s_p)) \quad (5.7)$$

si deduce immediatamente la dimensione dell’ accoppiamento b_p

$$b_p \sim L^{-2p+(p-1)d} \quad (5.8)$$

e quindi il parametro adimensionale che corrisponde a questa interazione è proporzionale a $b_p S^{p-(p-1)d/2}$. L’interazione è rilevante se

$$d < \frac{2p}{p-1}. \quad (5.9)$$

Per $d = 2$ c’è un numero infinito di interazioni rilevanti.

L’esponente ν al punto θ può essere stimato, come nel caso di buon solvente (vedi sezione 1.2), con un ragionamento *à la* Flory. L’energia libera totale può essere considerata come la somma di un termine entropico, che si ottiene considerando la catena in assenza di interazione (vedi (1.27)), e di un termine dovuto all’energia di interazione fra monomeri, che al punto θ corrisponde alla sola interazione a tre corpi. Quest’ ultimo sarà, con la solita approssimazione di campo medio,

$$E_{rep} \sim R^d \rho^3 = \frac{N^3}{R^{2d}}, \quad (5.10)$$

dove ρ è la densità di monomeri ed R è una misura dell’estensione media del polimero (ad esempio il raggio di girazione). L’energia libera totale, nella quale si è sostituita l’espressione (1.27) per il termine entropico e $R \sim N^\nu$, risulta

$$E_{rep} + F = N^{3-2d\nu} + N^{2\nu-1} - \nu(d-1) \log N + \text{cost} \quad (5.11)$$

Minimizzando la precedente rispetto a ν , nel limite di grandi N , cioè ponendo $3 - 2d\nu = 2\nu - 1$, si ottiene

$$\nu_{\theta F} = \frac{2}{d+1} \quad (5.12)$$

¹questa grandezza, per le soluzioni di polimeri, è definita dalla seguente equazione di stato che lega pressione osmotica Π , temperatura $1/\beta$ e concentrazione C .

$$\Pi\beta = C \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{d} \right)^{d/2} g(z, y; S/s_0) (C \langle R_e^2 \rangle^{d/2}) + \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi}{d} \right)^d h(z, y; S/s_0) (C \langle R_e^2 \rangle^{d/2})^2 + \dots \right] \quad (5.6)$$

dove $g(z, y; S/s_0)$, $h(z, y; S/s_0)$ sono rispettivamente secondo e terzo coefficiente del viriale e dipendono dai parametri adimensionali z, y .

Figura 5.1: (A) SKW ad anello su reticolo esagonale. I passi in grassetto sono automaticamente decisi per evitare auto-intersezioni, così come quelli ondulati onde evitare auto-intrappolamenti. Entrambi questi tipi di passi hanno peso statistico 1.

che da $\nu_{\theta F} = 2/3$ per $d = 2$. Altre stime di ν_{θ} sono state fatte, ad esempio, con uno sviluppo in serie di $\varepsilon' = 3 - d$ usando una teoria ϕ^6 con $n = 0$ [33] ed ottenendo

$$\nu_{\theta} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{4}{363} \varepsilon'^2 \right). \quad (5.13)$$

che per $\varepsilon' = 1$ da $\nu_{\theta} = 0.505$.

Questi valori sono comunque diversi da quelli ottenuti, negli stessi anni, tramite simulazioni numeriche (metodi Monte Carlo o matrice di trasferimento) o sperimentalmente [34] ($\nu_{\theta} = 0.56 \pm 0.01$). Infine, nel 1987, Duplantier e Saleur [1] hanno trovato, usando metodi di gas di Coulomb, valori esatti per gli esponenti tricritici in due dimensioni.

5.1 Punto Critico θ : risultati esatti in $d = 2$

I valori esatti degli esponenti critici in $d = 2$ sono stati ottenuti considerando un modello trattabile e poi applicando il principio di universalità. Per capire come si giunga ad esso, introduciamo un particolare tipo di cammino chiamato “smart kinetic walk” (SKW). Per i nostri scopi definiamo lo SKW come un processo in cui il cammino cresce su reticolo esagonale, in modo che, ad ogni passo, venga scelto il successivo tra quelli che non portano ad auto-intersezioni (eccetto che nell’origine) o ad auto-intrappolamenti. Si vede facilmente che gli SKWs chiusi corrispondono ad anelli self-avoiding con interazioni fra primi vicini e fra un sottoinsieme di “secondi” vicini (siti separati da un terzo). Si consideri il reticolo esagonale in Fig. 5.1 su cui si voglia generare un SKW: il primo passo è scelto con direzione casuale (probabilità $1/3$ per ciascuna delle direzioni) e si assegna un $+$ o un $-$ a ciascuno dei due esagoni che sta a lato del link scelto. Per il secondo ed i successivi passi si assegna all’esagono verso il quale si dirige il cammino un $+$ od un $-$ con probabilità $1/2$ e poi si compie il passo in modo da mantenere la separazione fra esagoni di segno opposto. Se questo esagono ha un segno già determinato, il passo è obbligato e quindi ha una probabilità di 1. Nel SAW tutti i passi hanno peso $1/2$ ad eccezione del primo che ha peso $1/3$; il peso statistico di un SAW è quindi $W_{SAW} = \frac{1}{3}(\frac{1}{2})^{N-1}$. Nello SKW invece i passi che servono per evitare auto-intersezioni (linee in grassetto in Fig. 5.1)

o auto-intrappolamenti (linee ondulate nella stessa figura) sono obbligati ed hanno peso 1. Se N_1 è il numero totale di queste linee, il peso statistico dello stesso cammino precedente, generato come SKW invece che come SAW, è uguale a $W_{SKW} = W_{SAW} \exp(N_1 \ln 2)$ e si dimostra facilmente che N_1 è uguale ad uno più il numero N_2 di esagoni contenenti due step non connessi del cammino, più due volte il numero N_3 di esagoni contenenti tre passi non connessi del cammino. Si può notare inoltre che $N_1 = N_{NN} + N'_{NNN}$ dove NN è il numero di monomeri primi vicini e NNN è un sottoinsieme dei “secondi” vicini. Infine se si definisce un ISAW con interazione $\varepsilon = E/kT$ per ogni primo vicino e per ogni “secondo” vicino che contribuisce ad N_1 , il peso del cammino è $W_{ISAW} = W_{SAW} \exp(\varepsilon N_1)$ che coincide con W_{SKW} per $\varepsilon^* = \varepsilon/k\theta' = \ln 2$ corrispondente ad una particolare temperatura $T = \theta'$.

Consideriamo adesso, sempre su reticolo esagonale, il modello di percolazione definito assegnando agli esagoni una probabilità p di avere segno $+$ ed $(1 - p)$ di avere segno $-$. Definiamo poi i “cluster” di percolazione come gli insiemi connessi di facce esagonali che hanno, ad esempio, il segno $+$. Il perimetro di un cluster è allora l’insieme dei link del reticolo che delimitano il cluster e costituisce un anello self-avoiding. A questo punto è evidente che gli SKWs chiusi sono in corrispondenza biunivoca (considerando equivalenti anelli formati dagli stessi link, anche se generati da cammini con origine in siti diversi o con orientazione opposta) con i perimetri dei cluster alla soglia di percolazione (Coniglio *et al.* [36], Weinrib *et al.* [35]). Infatti se immaginiamo di generare uno di questi perimetri passo per passo, le regole risultanti per la crescita del perimetro sono le stesse di quelle per gli SKWs: ad ogni passo si decide se il sito che si ha di fronte è occupato (con probabilità p) o vacante (con probabilità $(1 - p)$) e questo determina univocamente la direzione in cui deve girare il perimetro. Nel nostro caso si deve avere $p = 1/2$ e quindi uguale al suo valore critico (percolazione di siti sul reticolo triangolare duale)

Stabilendo un’equivalenza fra percolazione in $d = 2$ e gas di Coulomb (e servendosi come passo intermedio di un modello SOS), Saleur e Duplantier [37] hanno calcolato la dimensione frattale del perimetro esterno di un cluster alla soglia di percolazione grazie a cui si ottiene

$$\nu_{SKW} = \nu_{ISAW, \theta'} = 1/d_{hull} = 4/7 \simeq 0.5714. \quad (5.14)$$

Consideriamo adesso il modello di Saleur e Duplantier [1], ispirato direttamente a quello appena visto. Questo è un modello di SAW su reticolo esagonale, le facce del quale sono assenti con probabilità p . Gli spigoli degli esagoni assenti sono proibiti per i SAWs. Ogni configurazione di SAW ha un peso $(1 - p)^H$ dove H è il numero di esagoni per i quali almeno uno spigolo appartiene alla catena. Si vede facilmente che $H = N + 1 - N_2 - 2N_3$ dove N è il numero di passi del cammino. Questo fatto, che equivale come visto sopra alla presenza di interazioni fra primi vicini e fra un sottoinsieme dei secondi vicini, favorisce chiaramente le configurazioni collassate; argomenti di universalità ci spingono a supporre che questo modello sia nella stessa classe del punto θ ordinario (definito cioè per ISAWs con interazione fra soli primi vicini). La soglia di percolazione (sul reticolo duale triangolare) è $p_c = 1/2$. Per $p < 1/2$ non si ha la percolazione delle lacune. Esse scompaiono sotto successive trasformazioni del gruppo di rinormalizzazione raggiungendo il punto fisso $p = 0$ e il comportamento asintotico delle catene ha gli usuali esponenti dei polimeri in un buon solvente. Per $p > 1/2$, sotto successive rinormalizzazioni, si ha la percolazione delle lacune e si raggiunge il punto fisso $p = 1$. Le catene sono adesso compatte con esponenti per il caso denso [38]. Di conseguenza $p_c = 1/2$ corrisponde al

punto θ . Come detto sopra per gli SKW, insiemi connessi di facce mancanti possono essere rappresentati dal loro perimetro che forma anelli self-avoiding. Per $p = p_c$, facce presenti e facce mancanti sono ugualmente probabili e quindi i perimetri formano un gas di anelli tutti con peso relativo 1. È così facilmente stabilita la corrispondenza fra percolazione di siti su reticolo duale triangolare al punto critico e modello $O(n)$ di Nienhuis [16] su reticolo esagonale, con funzione di partizione

$$Z_n = \sum_{\mathcal{C}} K^{B(\mathcal{C})} n^{P(\mathcal{C})}, \quad (5.15)$$

(la somma essendo fatta sui grafici formati da P anelli per un numero totale di B link), nel caso $n = 1$, $K = 1$ (modello di Ising). $K = 1$ è nella fase di bassa temperatura del modello $O(n = 1)$ (per il quale il punto critico è $K_c = 1/\sqrt{3}$) che si sa essere critica [16], con una classe di universalità indipendente da $K > K_c$. Questo modello, originariamente pensato con SAW aperti, può essere esteso a poligoni, le cui proprietà, al punto θ , sono le stesse di quelle del gas di anelli nel modello $O(n)$ per $n = 1$, $K = 1$; Infatti, seppur di natura diversa, questi due tipi di poligoni sono indistinguibili. Questo ragionamento è rafforzato anche dalla conclusione di Coniglio *et al.* [36], Weinrib *et al.* [35], secondo cui il perimetro dei cluster di percolazione al punto critico ha le stesse proprietà dei cammini ad anello, con interazione del tipo visto sopra. Si ha quindi $\nu_\theta = 1/d_{hull} = 4/7$.

L'esponente di crossover ϕ è ottenuto notando che la transizione è controllata dalla percolazione delle vacanze. Lo “scaling field” termico è, nella percolazione, $p - p_c$ con lunghezza di correlazione che diverge come $|p - p_c|^{-\nu'}$ dove $\nu' = 4/3$. Quindi

$$\phi = \frac{\nu}{\nu'} = \frac{3}{7} \simeq 0.4286 \quad (5.16)$$

Infine l'esponente critico γ è definito da

$$c_N = \sum_{\mathcal{C}} (1 - p_c)^H \sim \mu^N N^{\gamma-1}. \quad (5.17)$$

Per ottenere γ introduciamo la funzione di correlazione

$$G(\mathbf{r}) = \sum_N c_N(\mathbf{r}) K^N, \quad (5.18)$$

$G(\mathbf{r})$ è lo sviluppo diagrammatico standard della funzione di correlazione spin-spin non connessa per il modello di Ising su reticolo esagonale. Dato che nella fase di bassa temperatura c'è una magnetizzazione spontanea, $G(\mathbf{r}) \sim |\mathbf{r}|^{-\eta}$ deve tendere ad una costante per $\mathbf{r} \rightarrow \infty$; quindi $\eta = 0$ e con l'usuale legge di scala si ottiene

$$\gamma = (2 - \eta)\nu = \frac{8}{7} \simeq 1.1428. \quad (5.19)$$

Si noti infine che $\mu = 1/K = 1$.

5.2 Distribuzione di probabilità della distanza estremo-estremo

In questa sezione vogliamo discutere la distribuzione di probabilità del vettore \mathbf{r} che unisce le estremità di un polimero, al punto critico θ . Per i polimeri in un buon solvente,

grazie alla corrispondenza con la teoria $\lambda\phi^4$ e con il modello σ , prolungati analiticamente ad $n = 0$, esistono risultati teorici che prevedono l'andamento qualitativo e che danno delle stime, utilizzando tecniche come l' ϵ -expansion, la g -expansion o gli sviluppi di strong-coupling, per gli esponenti critici e le altre costanti caratterizzanti la funzione di distribuzione nel limite di piccole e grandi distanze. Al punto critico θ , invece, esistono solo previsioni per gli esponenti critici (con metodi di gas di coulomb). Le altre costanti sono espresse in funzione di questi esponenti tramite le stesse formule che per i polimeri in un buon solvente, dove però i fattori di proporzionalità sono adesso incogniti. Dato che nel caso di buon solvente questi ultimi sono molto vicini ad uno, ci si può aspettare che anche nel caso del punto θ essi non differiscano eccessivamente dall'unità. Non essendo mai stati effettuati studi Monte Carlo sulla funzione di distribuzione al punto θ , questi sono di particolare interesse perchè permettono, in primo luogo, di controllare le previsioni sugli esponenti critici γ e ν e, in secondo luogo, di misurare per la prima volta le altre costanti che caratterizzano questa funzione dando così una stima dei fattori di proporzionalità incogniti.

Per prima cosa deriveremo alcune proprietà generali della funzione di distribuzione della distanza estremo-estremo per l'ISAW, proprietà che comunque sono indipendenti dalla presenza dell'interazione (essa cambia solo il valore degli esponenti critici a seconda della fase in cui si trovano i polimeri). Consideriamo un reticolo ipercubico d -dimensionale e sia $c_N(\mathbf{r})$ il numero di ISAW di N passi che vanno dall'origine ad \mathbf{r} . Studieremo la distribuzione normalizzata dell'estremo

$$P_N(\mathbf{r}) = \frac{c_N(\mathbf{r})}{\sum_{\mathbf{r}} c_N(\mathbf{r})}. \quad (5.20)$$

La distanza media estremo-estremo nell'ensemble N fissato, x variabile si definisce come

$$R_{e,N}^2 = \sum_{\mathbf{r}} |\mathbf{r}|^2 P_N(\mathbf{r}) \quad (5.21)$$

e la corrispondente lunghezza di correlazione

$$\xi_N^2 = \frac{1}{2d} R_{e,N}^2. \quad (5.22)$$

Nel limite $N \rightarrow \infty$, la funzione $P_N(\mathbf{r})$ ha la forma di scala [39, 10, 40]

$$P_N(\mathbf{r}) = \frac{1}{\xi_N^d} f(\rho) \quad (5.23)$$

dove $\rho = |\mathbf{r}|/\xi_N$. Per definizione

$$\int_0^\infty \rho^{d-1} d\rho f(\rho) = \frac{1}{S_d}, \quad (5.24)$$

$$\int_0^\infty \rho^{d+1} d\rho f(\rho) = \frac{2d}{S_d}, \quad (5.25)$$

dove S_d è il volume della sfera d -dimensionale

$$S_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}. \quad (5.26)$$

Il comportamento generale della funzione di scaling $f(\rho)$ è stato oggetto di molti studi [41, 42, 43]. Il primo risultato generale è dovuto a Fisher [40] il quale provò che, per $\rho \rightarrow \infty$, $\log f(\rho)$ si comporta come ρ^δ , con $\delta = 1/(1 - \nu)$ (Legge di Fisher).

Per provare questo risultato si comincia mostrando che

$$\liminf_{r \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{r} \log P(\mathbf{r}; \beta) \right] \geq -\log \beta \quad (5.27)$$

$$\limsup_{r \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{r} \log P(\mathbf{r}; \beta) \right] \leq d \log \left(\frac{2d}{\beta} \right) \quad (5.28)$$

dove, per $\beta < 1/\mu$,

$$P(\mathbf{r}; \beta) = \sum_{N=0}^{\infty} P_N(\mathbf{r}) \beta^N. \quad (5.29)$$

Da queste due disuguaglianze segue immediatamente che, se $\frac{\log P(\mathbf{r}; \beta)}{r}$ ha un limite per $r \rightarrow \infty$, allora

$$\log P(\mathbf{r}; \beta) \approx Ar + o(r) \quad (5.30)$$

Per dimostrare Eq. (5.27) si noti che

$$P_N(\mathbf{r}) \begin{cases} = 0 & \text{se } r > N, \\ < 1 & \text{se } r \leq N \end{cases} \quad (5.31)$$

da cui

$$P(\mathbf{r}; \beta) < \sum_{N=r}^{\infty} \beta^N = \frac{\beta^r}{1 - \beta}. \quad (5.32)$$

Eq. (5.27) segue immediatamente. Per provare Eq. (5.28) si noti che per $N > rd$ si ha

$$P_{N-1}(\mathbf{r}) + P_N(\mathbf{r}) > \frac{1}{(2d)^N} \quad (5.33)$$

Infatti, nella palla di raggio N/d ogni punto è connesso all'origine da almeno un sito di lunghezza N o $N-1$, a seconda della parità del sito. Allora

$$P(\mathbf{r}; \beta) > \frac{1}{2} \sum_{N=rd}^{\infty} \left(\frac{\beta}{2d} \right)^N = \left(\frac{\beta}{2d} \right)^{rd} \frac{d}{2d - \beta}. \quad (5.34)$$

Eq. (5.28) segue immediatamente.

Ora, usando Eq. (5.23), per $N \rightarrow \infty$, possiamo scrivere

$$P(\mathbf{r}; \beta) \approx \int dN \frac{\beta^N}{(AN^\nu)^d} f\left(\frac{r}{AN^\nu}\right), \quad (5.35)$$

dove abbiamo usato $\xi_N \approx AN^\nu$ per $N \rightarrow \infty$. Assumiamo come Fisher che

$$f(\rho) \approx f_\infty \rho^\sigma \exp(-D\rho^\delta). \quad (5.36)$$

Sostituendo in Eq. (5.35) e applicando il metodo del punto sella otteniamo

$$\log P(\mathbf{r}; \beta) \sim (-r \log \beta)^{\delta/(\delta\nu+1)}. \quad (5.37)$$

Allora, confrontando con Eq. (5.30), si ottiene

$$\delta = \frac{1}{1 - \nu}. \quad (5.38)$$

Si può anche predire il comportamento di $f(\rho)$ nel limite $\rho \rightarrow 0$. Sia infatti \mathbf{e} un primo vicino dell'origine. Dato che, per $N \rightarrow \infty$,

$$c_N(\mathbf{e}) \sim \mu^N N^{\alpha-2} \quad \text{e che} \quad c_N \sim \mu^N N^{\gamma-1} \quad (5.39)$$

si ha

$$P_N(\mathbf{e}) \sim N^{\alpha-\gamma-1}. \quad (5.40)$$

Perciò, se si scrive per $\rho \rightarrow 0$

$$f(\rho) \approx f_1 \rho^\theta \quad (5.41)$$

si ottiene

$$\theta = \frac{\gamma + 1 - \alpha - \nu d}{\nu} \quad (5.42)$$

Usando adesso la relazione tra ISAW e modello $O(n)$ dove $n = 0$ per $\beta < \beta_\theta$ oppure $n = 1$ per $\beta = \beta_\theta$ si può verificare che α è l'esponente del calore specifico. Perciò α soddisfa la relazione di hyperscaling $2 - \alpha = d\nu$ e ne segue che

$$\theta = \frac{\gamma - 1}{\nu} \quad (5.43)$$

Deriveremo adesso una formula per l'esponente σ in termini di ν e γ e per le altre tre costanti f_∞, D e f_1 in termini di fattori di proporzionalità incogniti. La derivazione è analoga a quella per il SAW [4, 44], salvo per l'uso dei risultati ottenuti con ϵ -expansion, g -expansion in $d = 3$ o con strong-coupling in $d = 2$ per il modello σ non lineare, in fase non rotta e nel limite $n = 0$, adesso non più utilizzabili.

Definiamo, analogamente a quanto visto in sezione 1.3.2, la funzione a due punti

$$G(\mathbf{r}; \beta) = \sum_{N=0}^{\infty} e^{-\beta N} c_N(\mathbf{r}) \quad (5.44)$$

e la sua trasformata di Fourier

$$\hat{G}(\mathbf{q}; \beta) = \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \beta) \quad (5.45)$$

Introduciamo poi la distanza media estremo-estremo definita come

$$R_e^2(\beta) \equiv \frac{\sum_{\mathbf{r}} |\mathbf{r}|^2 G(\mathbf{r}; \beta)}{\sum_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \beta)} \quad (5.46)$$

e la lunghezza di correlazione

$$\xi^2(\beta) \equiv \frac{1}{2d} R_e^2(\beta) \quad (5.47)$$

Analogamente a quanto succede per il SAW (vedi sezione 1.3.2) possiamo supporre che l'ISAW sia in corrispondenza con una teoria di campo che nel limite critico $\beta \rightarrow \beta_c = \ln \mu = 0$ ($\beta \geq 0$) si riduca al modello $O(n = 1)$ di Niehuis con $\mu = 1/K = 1$. In questo limite, l'usuale ipotesi di scala [45, 46] suggerisce per $\hat{G}(\mathbf{q}; \beta)$ una forma di scala del tipo

$$\hat{G}(\mathbf{q}; \beta) = \hat{G}(\mathbf{0}; \beta) D(Q) \quad (5.48)$$

dove $Q \equiv |\mathbf{q}| \xi(\beta)$. Supponiamo inoltre che, per $Q \ll 1$, $D(Q)$ abbia il seguente sviluppo regolare in termini di Q^2

$$D^{-1}(Q) = 1 + Q^2 + \sum_{n=2}^{\infty} b_n Q^{2n} \quad (5.49)$$

dove l'ultimo termine parametrizza la deviazione dal comportamento gaussiano. La condizione $D(0) = 1$ implica che $\hat{G}(\mathbf{0}; \beta) = \chi(\beta) \approx C/|\beta - \beta_c|^\gamma$ per $\beta \rightarrow \beta_c$ mentre la condizione $\frac{dD}{dQ^2}(0) = -1$ deriva dal fatto che $\xi^2(\beta)$ è il momento secondo di $G(\mathbf{r}; \beta)$.

Per $Q \gg 1$ il comportamento di $D(Q)$ è predetto dal gruppo di rinormalizzazione

$$D(Q) = \frac{D_0}{Q^{2-\eta}} + \frac{D_1}{Q^{2-\eta+(1-\alpha)/\nu}} + \frac{D_2}{Q^{2-\eta+1/\nu}} + \dots \quad (5.50)$$

Infine, supponendo che nella regione critica la funzione a due punti sia quasi gaussiana (i coefficienti b_n nell' Eq. (5.49) siano piccoli) in una larga regione attorno a $\mathbf{q}^2 = 0$, cioè per $Q^2 = \mathbf{q}^2 \xi(\beta) \lesssim 1$ (ipotesi supportata anche dal fatto che per il nostro modello $\eta = 0$), si può dedurre il comportamento a grandi distanze della funzione a due punti che risulta

$$\frac{G(\mathbf{r}; \beta)}{\chi(\beta)} \xi(\beta)^d \approx A(\beta) \left(\frac{\xi(\beta)}{|\mathbf{r}|} \right)^{(d-1)/2} e^{-m(\beta)|\mathbf{r}|} \quad (5.51)$$

Per $\beta \rightarrow \beta_c$ la quantità $m(\beta)\xi(\beta)$ converge ad una costante definita dalla seguente equazione

$$m(\beta)\xi(\beta) \rightarrow \sqrt{S_M^*} \quad (5.52)$$

Per $\beta \rightarrow \beta_c$ la costante $A(\beta)$ converge ad una costante universale A^* che può essere espressa (per comodità di confronto con il caso del SAW) in termini di S_M^* e S_Z^* , dove quest'ultima parametrizza il comportamento "mass-shell" di $\hat{G}(\mathbf{q}; \beta)$ ed è definita da

$$S_Z^* = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial Q^2} D^{-1}(Q) \Big|_{Q^2 = -S_M^2} \quad (5.53)$$

Segue allora che

$$A^* = \frac{(S_M^*)^{(d-3)/4}}{2S_Z^*} (2\pi)^{1-d/2} \quad (5.54)$$

Dai risultati per $G(\mathbf{r}; \beta)$ si ottiene facilmente [4] le corrispondenti predizioni per $f(\rho)$. Infatti basta effettuare una trasformata di Laplace inversa

$$c_N(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} d\beta e^{\beta N} G(\mathbf{r}; \beta) \quad (5.55)$$

Riporteremo ora i vari risultati che possono essere trovati, per esempio in Ref. [4]. Usando Eq. (5.51) si deriva il comportamento di $f(\rho)$ per grandi ρ . Il risultato è

$$f(\rho) \approx f_\infty \rho^\sigma \exp(-D\rho^\delta) \quad (5.56)$$

dove f_∞ , D , σ e δ sono dati da

$$\delta = \frac{1}{1-\nu} \quad (5.57)$$

$$\sigma = \frac{2\nu d - 2\gamma + 2 - d}{2(1-\nu)} \quad (5.58)$$

$$D = \frac{1-\nu}{\nu} \left(\nu^2 S_M^* \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma+2\nu)} \right)^{\delta/2} \quad (5.59)$$

$$f_\infty = \frac{(S_M^*)^{(d-3)/4}}{2S_Z^*} \frac{\Gamma(\gamma)}{(2\pi)^{d/2} (1-\nu)^{1/2}} \cdot (\nu^2 S_M^*)^{\delta(\nu(d+1)-2\gamma+1)/4} \left(\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma+2\nu)} \right)^{\delta(2-2\gamma+d)/4} \quad (5.60)$$

Nel caso del SAW le costanti S_M^* e S_Z^* sono state calcolate in $d = 3$ con ε -expansion, all'ordine $O(\varepsilon^3)$, e con la g -expansion, all'ordine $O(g^3)$, mentre in $d = 2$ con analisi di strong-coupling. In entrambi i casi tutte e due le costanti risultano uguali ad uno a meno di una correzione dell'ordine di $1/10^4$ ovverosia molto vicini al loro valore nel caso gaussiano. Per l'ISAW al punto θ non si hanno previsioni teoriche per queste costanti, e la misura con metodi Monte Carlo di D e di f_∞ può servire quindi a dare delle stime per questi fattori incogniti. Utilizzando i valori degli esponenti critici ν e γ al punto θ in $d = 2$ si ottiene $\delta = 7/3$ e $\sigma = 0$.

Possiamo poi studiare il comportamento di $f(\rho)$ per $\rho \rightarrow 0$

$$f(\rho) \approx f_1 \rho^\theta \quad (5.61)$$

e, utilizzando l'Eq. (5.50) otteniamo

$$\theta = \frac{\gamma - 1}{\nu} \quad (5.62)$$

$$f_1 = \frac{\Gamma(\gamma) D_1}{(4\pi)^{d/2} 2^\theta \pi} \sin(\pi d \nu) \Gamma(d \nu) \left(\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma + 2\nu)} \right)^{(\theta+d)/2} \frac{\Gamma(-\theta/2)}{\Gamma((\theta + d)/2)} \quad (5.63)$$

ed usando il valore degli esponenti al punto θ (sempre in $d = 2$) si ottiene $\theta = 1/4$.

Per misurare le varie costanti da una simulazione Monte Carlo, è utile considerare la probabilità che un estremo del cammino giaccia su di una retta parallela ad un asse coordinato, ad una distanza x dall' origine del cammino (“probabilità di parete”) e cioè

$$P_{N,w}(x) = \sum_y P_N(x, y) \quad (5.64)$$

che nel limite di grandi N ha la forma di scala

$$P_{N,w}(x) = \frac{1}{\xi_N} f_w(\rho) \quad (5.65)$$

dove $\rho = |x|/\xi_N$. È facile vedere che per larghi ρ si ha

$$f_w(\rho) \approx f_{w,\infty} \rho^{\sigma_w} \exp(-D\rho^\delta) \quad (5.66)$$

dove

$$\sigma_w = \delta \left(\nu - \gamma + \frac{1}{2} \right) \quad (5.67)$$

$$f_{w,\infty} = f_\infty (2\pi\nu)^{(d-1)/2} \left(\frac{\nu^2 S_M^* \Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma + 2\nu)} \right)^{\delta(1-d)/4} \quad (5.68)$$

Di nuovo, inserendo i valori esatti degli esponenti, si ottiene $\sigma_w = -1/6$

Infine una rappresentazione fenomenologica per la funzione $f(\rho)$ è stata proposta da Mazur [47], McKenzie e Moore [39] e des Cloiseaux [4]:

$$f(\rho) \approx \tilde{f} \rho^\theta \exp(-\tilde{D}\rho^\delta) \quad (5.69)$$

dove δ e θ sono fissati dalle Eq. (5.57) e (5.62) mentre \tilde{f} e \tilde{D} sono fissati dalle condizioni di normalizzazione (5.24)

$$\tilde{D} = \left\{ \frac{\Gamma[(1-\nu)(2+d+\theta)]}{2d\Gamma[(1-\nu)(d+\theta)]} \right\}^{\delta/2}, \quad (5.70)$$

$$\tilde{f} = \frac{\delta \tilde{D}^{(d+\theta)(1-\nu)}}{S_d \Gamma[(1-\nu)(d+\theta)]}. \quad (5.71)$$

Oltre alla distribuzione di probabilità della distanza estremo-estremo (5.23) si possono definire altre due distribuzioni di probabilità $P_N^1(\mathbf{r})$ e $P_N^2(\mathbf{r})$, definite nel limite di lunghezza infinita della catena, che corrispondono alla probabilità che il vettore congiungente le estremità di un segmento di lunghezza N della catena, che costituisce rispettivamente un'estremità o una parte interna della catena, sia uguale ad \mathbf{r} . Anche in questo caso, nel limite $N \rightarrow \infty$ esse hanno una forma di scala

$$P_N^i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\xi_N^d} f^i(\rho), \quad i = 1, 2 \quad (5.72)$$

dove ρ è definito nella (5.23), ξ_N nella (5.22) e si riferisce all'estensione del segmento di lunghezza N . Le f^i si comportano per piccole lunghezze in modo analogo alla (5.41)

$$f(\rho)^i \approx f_1^i \rho^{\theta^i} \quad (5.73)$$

Il valore degli esponenti θ^i , per il SAW, è stato calcolato in $d = 3$ con l' ε -expansion all'ordine $O(\varepsilon^2)$. Queste stime risultano piuttosto incerte ed in disaccordo con i valori delle simulazioni numeriche. In $d = 2$, metodi di invarianza conforme hanno permesso di ottenere valori esatti espressi tramite la formula (vedi ad esempio [4])

$$\theta^i = \frac{1}{48}(9i^2 + 9i + 22) \quad (5.74)$$

Al punto θ in due dimensioni, sfruttando la relazione con il modello $O(n = 1)$ nella fase rotta, Saleur e Duplantier [1] hanno ottenuto i seguenti valori esatti

$$\theta^1 = \frac{5}{12} \quad \text{e} \quad \theta^2 = \frac{3}{4}. \quad (5.75)$$

Dalla forma (5.72) per $P_N^i(\mathbf{r})$ si ottiene, ponendo $\mathbf{r} = \mathbf{e}$, dove \mathbf{e} è un primo vicino dell'origine, la probabilità che si formi un anello di lunghezza N ad una estremità (se $i = 1$) o all'interno (se $i = 2$) della catena. Dato che $\xi \sim N^\nu$ si ottiene

$$P_N^i \propto N^{-\nu(\theta^i+d)} \quad (5.76)$$

Applichiamo adesso questi risultati per $i = 1$ a catene di lunghezza finita \mathcal{N} . Sommando su tutte le possibili lunghezze degli anelli ad una estremità della catena di lunghezza fissata \mathcal{N} , Saleur e Duplantier [48] hanno ottenuto la probabilità che un estremo del cammino sia primo vicino del cammino stesso come funzione di \mathcal{N} .

$$P_N^{ENN} = \sum_{N=N_{min}}^{\mathcal{N}} N^{-\nu(\theta^1+d)} \simeq \int_{N_{min}}^{\mathcal{N}} dx x^{-\nu(\theta^1+d)} = A - B \frac{1}{\mathcal{N}^{\nu(\theta^1+d)-1}} \quad (5.77)$$

con $A, B > 0$. In $d = 2$ si ha

$$\nu(\theta^1 + d) - 1 = \begin{cases} 9/8 & \text{per il SAW,} \\ 8/21 & \text{al punto } \theta. \end{cases} \quad (5.78)$$

Capitolo 6

Simulazioni numeriche al punto θ in $d = 2$

In questo capitolo verranno discussi i risultati numerici delle simulazioni Monte Carlo volte allo studio del modello di SAW interagente al punto θ definito a pagina 21. Esse sono state effettuate per mezzo dell'algoritmo Bilocal + Reptation, che, come detto in precedenza, è stato progettato proprio a tale fine. Non essendo noto il valore esatto di β corrispondente, si è usato il valore ottenuto con una delle simulazioni numeriche più precise fino ad oggi [49], secondo cui $\beta = 0.665 \pm 0.002$. Fissato questo parametro, si è effettuato uno studio del comportamento dinamico dell'algoritmo analogamente a quanto fatto nel capitolo 4. Rispetto al caso $\beta = 0$, l'algoritmo risulta rallentato per due motivi: l'introduzione del test Metropolis e la diminuzione della probabilità di successo del test di self-avoidance a causa della forma più compatta dei cammini. Si è poi passati allo studio, fino ad ora mai effettuato al punto θ , di alcune caratteristiche di statica: la distribuzione di probabilità della distanza estremo-estremo; la probabilità che un estremo sia primo vicino del cammino stesso; gli autovalori del tensore di girazione ed altre quantità che descrivono la forma di un polimero insieme alle relative funzioni di distribuzione. Nei primi due casi esistono previsioni teoriche legate, come mostrato nel capitolo precedente, ai valori esatti degli esponenti critici disponibili in $d = 2$ ed è quindi importante verificare il loro accordo con i risultati delle simulazioni numeriche.

6.1 Simulazioni al punto θ : caratteristiche generali

Lo studio del punto θ consiste, in primo luogo, nella misura degli esponenti critici, noti esattamente in $d = 2$. Per il SAW senza interazione, come visto a pag. 16, gli effetti di correzioni allo scaling diminuiscono all'aumentare della lunghezza del cammino. Nel caso del SAW interagente si ha invece un comportamento simile solo al punto critico. Per β vicini a β_c si ha un "cross-over" fra comportamento simile a quello che si ha al punto θ , per piccoli N , e comportamento di alte temperature (nella classe di universalità del SAW) o di basse temperature (fase collassata), per grandi N . Questo comportamento viene spesso sfruttato per una determinazione numerica del punto critico [49], [50]. Ad esempio per i raggi ci si aspetta un comportamento del tipo

$$\langle R^2 \rangle_N^{1/2} = N^{\nu_\theta} f_\pm(N^{\phi_\theta} |\beta - \beta_c|), \quad (6.1)$$

che definisce l'esponente di "cross-over" ϕ_θ . Per $\beta \rightarrow \beta_c$ e $x \equiv N^{\phi_\theta}|\beta - \beta_c|$, $f_\pm(x)$ si comporta come segue

$$f_+(x) \sim \begin{cases} x^{(\nu_{SAW}-\nu_\theta)/\phi_\theta} & \text{per } x \rightarrow \infty \\ \text{cost.} & \text{per } x \rightarrow 0 \end{cases} \quad \beta < \beta_c, \quad (6.2)$$

$$f_-(x) \sim \begin{cases} x^{(1/d-\nu_\theta)/\phi_\theta} & \text{per } x \rightarrow \infty \\ \text{cost.} & \text{per } x \rightarrow 0 \end{cases} \quad \beta > \beta_c. \quad (6.3)$$

L'esponente ϕ_θ può essere stimato notando che

$$\frac{1}{\langle R^2 \rangle_N} \frac{\partial \langle R^2 \rangle_N}{\partial \beta} = \frac{\langle R^2 \mathcal{E} \rangle_N - \langle R^2 \rangle_N \langle \mathcal{E} \rangle_N}{\langle R^2 \rangle_N} \Big|_{\beta=\beta_c} \sim N^{\phi_\theta} \quad (6.4)$$

Un altro metodo per stimare ϕ_θ è quello di misurare il valore del calore specifico (e quindi, come mostrato a pagina 21, delle fluttuazioni dell'energia) per $\beta = \beta_c$. Per esso si suppone, al solito, un comportamento del tipo

$$C_N(\beta) = N^{y_\theta} g_\pm(N^{\phi_\theta}|\beta - \beta_c|), \quad (6.5)$$

Per $\beta \rightarrow \beta_c$ e $x \equiv N^{\phi_\theta}|\beta - \beta_c|$, $g_\pm(x)$ si comporta come segue

$$g_+(x) \sim \begin{cases} A^+ x^{-\alpha_\theta} & \text{per } x \rightarrow \infty \\ \text{cost.} & \text{per } x \rightarrow 0 \end{cases} \quad \beta < \beta_c, \quad (6.6)$$

$$g_-(x) \sim \begin{cases} A^- x^{\alpha_\theta} & \text{per } x \rightarrow \infty \\ \text{cost.} & \text{per } x \rightarrow 0 \end{cases} \quad \beta > \beta_c. \quad (6.7)$$

dove $\alpha_\theta = 2 - 1/\phi_\theta$ (vedi ad esempio [51]) che porta a $\phi_\theta = (1 + y_\theta)/2$.

Un'altro metodo per determinare il punto θ è stato suggerito da Guttman *et al.* [52]. Dato che la relazione 1.71 a pag. 16 collega quantità universali, viene fatta l'ipotesi che essa mantenga la sua validità anche nel caso dell'ISAW al punto critico o nella fase collassata di bassa temperatura. Al punto θ , $\nu = 4/7$ e $\gamma = 8/7$ implicano $\lambda = 23/8 = 2.875 \dots$. Nel lavoro sopra citato, si assume per λ il valore teorico e si utilizzano metodi di estrapolazione di risultati da enumerazione esatta per cammini lunghi fino ad $N = 29$, per ottenere la stima $\beta_c = 0.660 \pm 0.005$ che in buon accordo con i valori ottenuti dalle simulazioni Monte Carlo.

Nel nostro caso si è scelto un valore di β supposto nelle immediate vicinanze di β_c , e si sono effettuate le simulazioni mantenendo questo parametro fissato. Sono state eseguite simulazioni su reticolo quadrato per SAWs di lunghezze $N = 100, 800, 1600$ misurando le seguenti osservabili: i raggi medi $\langle R_g^2 \rangle_N, \langle R_e^2 \rangle_N, \langle R_m^2 \rangle_N$ e i loro rapporti universali A_N, B_N, C_N ; l'energia media $\langle \mathcal{E} \rangle_N$ e le sue fluttuazioni ($\langle \mathcal{E}^2 \rangle_N - \langle \mathcal{E} \rangle_N^2$); il rapporto $D_N \equiv -(\langle \mathcal{E} R_g^2 \rangle_N - \langle \mathcal{E} \rangle_N \langle R_g^2 \rangle_N) / \langle R_g^2 \rangle_N$ e, per stimare l'errore su questo rapporto come spiegato a pag. 70, la varianza dell'osservabile

$$\frac{(\mathcal{E} - \langle \mathcal{E} \rangle_N)(R_g^2 - \langle R_g^2 \rangle_N)}{\langle (\mathcal{E} - \langle \mathcal{E} \rangle_N)(R_g^2 - \langle R_g^2 \rangle_N) \rangle} - \frac{R_g^2}{\langle R_g^2 \rangle_N}. \quad (6.8)$$

I Risultati sono riportati in Tab. 6.1, 6.2. Si noti che, essendo la correlazione ($\langle \mathcal{E} R_g^2 \rangle_N - \langle \mathcal{E} \rangle_N \langle R_g^2 \rangle_N$) calcolata con valori di \mathcal{E} e di R_g^2 misurati sulla stessa configurazione, le misure utili per calcolarla saranno solo quelle effettuate a distanza l'una dall'altra di un numero

N	n° misure	$\langle R_g^2 \rangle_N$	$\langle R_e^2 \rangle_N$	$\langle R_m^2 \rangle_N$
100	$1.946 \cdot 10^8$	43.4383 ± 0.0075	241.867 ± 0.070	123.023 ± 0.026
800	$2.095 \cdot 10^7$	472.62 ± 0.29	2603.36 ± 2.52	1331.55 ± 0.96
1600	$1.295 \cdot 10^7$	1051.54 ± 0.86	5790.4 ± 7.3	2960.83 ± 2.82
N	n° misure	A_N	B_N	C_N
100	$1.946 \cdot 10^8$	0.179595 ± 0.000028	0.508637 ± 0.000065	0.353092 ± 0.000031
800	$2.095 \cdot 10^7$	0.181541 ± 0.000092	0.51147 ± 0.00021	0.35494 ± 0.00103
1600	$1.295 \cdot 10^7$	0.18160 ± 0.00012	0.51134 ± 0.00027	0.35515 ± 0.00013

Tabella 6.1: Stime per le misure “classiche” della *dimensione* di un SAW e per i rapporti universali fra ampiezze (l’errore è una deviazione standard).

N	n° misure	$\langle \mathcal{E} \rangle_N$	$(\langle \mathcal{E}^2 \rangle_N - \langle \mathcal{E} \rangle_N^2)$	n° misure	D_N
100	$2.433 \cdot 10^8$	46.3045 ± 0.0024	68.093 ± 0.016	$4.866 \cdot 10^7$	2.2793 ± 0.0010
800	$2.095 \cdot 10^7$	429.718 ± 0.025	909.49 ± 0.58	$2.095 \cdot 10^7$	6.822 ± 0.011
1600	$1.295 \cdot 10^7$	877.591 ± 0.048	2031.89 ± 1.59	$1.295 \cdot 10^7$	9.518 ± 0.021

Tabella 6.2: Stime per l’energia media, per le sue fluttuazioni e per il rapporto D_N (l’errore è una deviazione standard).

di iterazioni pari al minimo comune multiplo dei numeri di iterazioni che intercorrono fra misure successive dei i raggi e dell’ energia.

Dai valori in Tab. 6.1 si possono stimare i valori $\hat{\lambda}_N$ da confrontare, nel limite $N \rightarrow \infty$, con il valore teorico $\lambda = 2.875 \dots$. Si ottiene $\hat{\lambda}_{100} = 2.880 \pm 0.001$, $\hat{\lambda}_{800} = 2.881 \pm 0.004$ e $\hat{\lambda}_{1600} = 2.878 \pm 0.005$; come si vede l’accordo è abbastanza buono anche per N relativamente piccoli, per i quali sicuramente sono presenti correzioni allo scaling rilevanti. Per avere un’ indicazione sulla bontà della stima da noi utilizzata come valore di β_c , è comunque necessario utilizzare cammini più lunghi, in modo da poter osservare eventuali effetti di cross-over.

Assumendo per raggi, D_N , energia e sue fluttuazioni una legge del tipo AN^z (dove z è l’esponente critico corrispondente), che trascura totalmente le correzioni allo scaling, sono stati eseguiti fit con il metodo dei minimi quadrati per i loro logaritmi vs $\log N$. I risultati sono riportati in Tab. 6.3.

Come si vede dall’elevato valore del χ^2 , le correzioni allo scaling, ed in particolare quelle per \mathcal{E} e per D_N , non sono affatto trascurabili. Un’ analisi più corretta consiste nel calcolare il valore degli esponenti sui primi due punti e sugli ultimi due, ottenendo così i risultati esposti in Tab. 6.4.

Per quanto riguarda l’esponente ν (il cui valore teorico, come mostrato in sezione 5.1, è $4/7 = 0.5714 \dots$) si può osservare come questo aumenti al crescere della lunghezza dei cammini che vengono usati per la stima. Questo lascia supporre che il valore di β scelto sia più piccolo del valore corrispondente al punto θ e che quindi il comportamento, per

	R_g^2	R_e^2	R_m^2	$\langle \mathcal{E} \rangle$	D_N
$z \pm \sigma_z \cdot \sqrt{\chi^2}$	0.5743 ± 0.0004	0.5721 ± 0.0007	0.5732 ± 0.0005	1.063 ± 0.008	0.521 ± 0.006
$A \pm \sigma_A \cdot \sqrt{\chi^2}$	0.219 ± 0.001	1.24 ± 0.01	0.627 ± 0.003	0.347 ± 0.017	0.207 ± 0.006
χ^2 (d.f.=1)	12.3	16.5	14.8	87750	110

Tabella 6.3: Risultato dei fit per $R_g^2, R_e^2, R_m^2, \langle \mathcal{E} \rangle$ e D_N (l’errore è stimato tenendo conto dell’elevato valore del χ^2).

	R_g^2	R_e^2	R_m^2	$\langle \mathcal{E} \rangle$	D_N
z_1	0.5739	0.5713	0.5727	1.071	0.527
z_2	0.5768	0.5766	0.5764	1.030	0.480

Tabella 6.4: Stime per gli esponenti critici calcolate sui primi due e sugli ultimi due punti.

$N \rightarrow \infty$, sia quello di alta temperatura con $\nu = \nu_{SAW} = 3/4$. Per controllare l'accordo fra le nostre simulazioni ed il lavoro di Grassberger [49], sarebbe interessante effettuare un "reweighting" dei dati raccolti calcolando i valori medi delle osservabili ad una temperatura più bassa. Si potrebbe così cercare un intervallo di valori di β nel quale ν si avvicini al valore teorico al crescere di N , da confrontare poi con l'intervallo d'errore riportato in [49].

Le correzioni allo scaling per $\langle \mathcal{E} \rangle_N$ e per D_N hanno lo stesso segno; questo fatto può essere sfruttato per eliminare parzialmente il loro effetto sulla stima di ϕ usando per essa il rapporto $D_N / \langle \mathcal{E} \rangle_N \sim N^{\phi-1}$. Dato che $\langle \mathcal{E} \rangle_N \sim N$ per $N \rightarrow \infty$ (vedi pag. 21) questo rapporto ha un comportamento del tipo $\sim N^{\phi-1}$. In questo modo si ottengono $\phi_1 = 0.456$ e $\phi_2 = 0.450$, che si avvicinano, rispetto ai valori calcolati usando semplicemente D_N , al valore teorico $\phi = 3/7 = 0.4285 \dots$ (vedi sezione 5.1). In ogni caso il metodo usato, in cui si suppone $\beta = \beta_c$, è molto sensibile a piccoli discostamenti dalla temperatura critica e ciò non permette alcuna conclusione definitiva riguardo all'esponente ϕ senza che sia prima noto con grande precisione il valore di β_c .

Si è infine provato a stimare ϕ utilizzando il calore specifico; in questo caso però le correzioni allo scaling sono decisamente più grandi che per D_N e non si è trovato alcuna soluzione *ad hoc* per diminuirne sensibilmente l'effetto sulla stima di ϕ , che risulta più elevata delle precedenti. Questa difficoltà è stata incontrata in numerosi lavori (vedi ad esempio [50]), nei quali si valuta $\phi \approx 0.6$, in accordo con le osservazioni da noi effettuate per tale metodo.

6.2 Comportamento dinamico dell'algoritmo

Riportiamo in Tab. 6.5 i valori dei tempi di autocorrelazione integrati per $\langle R_g^2 \rangle_N$, $\langle R_e^2 \rangle_N$, $\langle R_m^2 \rangle_N$, A_N , B_N , C_N , \mathcal{E} insieme ai risultati dei relativi fit.

Come si vede, il valore del χ^2 è abbastanza elevato in quasi tutti i casi, ed in particolare per l'energia. Ciò può essere dovuto, per l'energia, a errori sistematici causati dalla parte di coda non considerata nel computo di τ_{int} (vedi spiegazione a pag. 73), e in tutti i casi, agli effetti del cross-over e delle correzioni allo scaling. Una stima più corretta degli esponenti critici si ottiene con un calcolo sui primi due punti e sugli ultimi due, grazie a cui si ottengono informazioni sul comportamento del loro valore effettivo al variare di N , che, nel limite $N \rightarrow \infty$, dovrebbe tendere ad un valore asintotico. Per l'energia si ha $z_1 = 2.158$ e $z_2 = 2.208$.

Sono stati poi effettuati i fit delle funzioni di autocorrelazione secondo la forma $A_{\mathcal{O}} e^{-t/\tau_{exp,\mathcal{O}}}$ per estrarre informazioni sui tempi esponenziali $\tau_{exp,\mathcal{O}}$ delle varie osservabili e sull'ampiezza $A_{\mathcal{E}}$ della coda esponenziale di $\rho_{\mathcal{E}}(t)$. Tali fits sono risultati piuttosto instabili, in particolare nel caso dei rapporti universali A_N, B_N, C_N , per i quali il tempo di decadimento è più piccolo (rispetto a quello dei raggi), e la regione dove si dovrebbe osservare il decadimento esponenziale è la stessa in cui il rumore diventa rilevante. Que-

sto può essere motivo di errore nella valutazione di τ_{exp} . Facendo poi un fit per queste quantità con una legge del tipo AN^b si ottiene l'esponente dinamico b . I risultati sono riportati in Tab. 6.6. L'elevato valore del χ^2 , in particolare per A_N, B_N, C_N , può essere causato, in parte, dalle difficoltà incontrate nel fit delle funzioni di autocorrelazione e, in parte, dalle già citate correzioni allo scaling ed effetti di cross-over.

Si è eseguito infine il rescaling delle funzioni $\tau_{\mathcal{O}}(t)$, definite dalla (4.8), ed i risultati sono riportati in Tab. 6.7. La sovrapposizione delle tre funzioni con $N = 100, 800, 1600$ risulta abbastanza buona, entro gli errori, per tutte le osservabili considerate, anche se, l'entità delle barre d'errore, non permette una risoluzione particolarmente accurata (vedi ad esempio fig. 6.1). Come già nel capitolo 4, va comunque specificato che gli effetti di cross-over e di correzioni allo scaling, che sembrano evidenti dai fit per gli esponenti dinamici, sono probabilmente troppo piccoli per essere rilevati in modo chiaro dal rescaling “a vista” delle funzioni $\tau_{\mathcal{O}}(t)$, mentre sono grandi in confronto agli errori sulle stime dei tempi di autocorrelazione, data l'elevata statistica raccolta.

I valori di a e di b per cui si ha la sovrapposizione simultanea sono sostanzialmente in accordo con i risultati dell'analisi dei tempi esponenziali ed evidenziano come i tempi esponenziali dei raggi e dei rapporti universali abbiano un esponente critico uguale a quello dei tempi integrati ($a \approx 0$ per essi) mentre, nel caso dell'energia, $\tau_{exp,\varepsilon}$ abbia un esponente dinamico differente da quello di $\tau_{int,\varepsilon}$ (in questo caso $a \simeq 0.07 \pm 0.01$). La legge di scaling dinamico (vedi Eq. (4.10)) prevede, quindi, per τ_{int} un esponente $z_{int} = (1 - a)b \approx 2.15$, in buon accordo con quello stimato dai fit sui tempi integrati. Si è verificato, infine, che l'ampiezza A_{ε} della coda esponenziale dell'energia decresca con un esponente $c = z_{int} - z_{exp}$, come mostrato dalla (4.13). Considerando i valori di z_{int}, z_{exp} ottenuti dai fit si ha $c \simeq -0.146$ che coincide perfettamente con il valore dell'esponente di A_{ε} in Tab. 6.6.

Confrontando i tempi integrati ed esponenziali del presente algoritmo a $\beta = 0$ con quelli dello stesso a $\beta = 0.665$ si osserva un aumento corrispondente al rallentamento

N	τ_{int,R_g^2}	τ_{int,R_e^2}	τ_{int,R_m^2}	$\tau_{int,\varepsilon}$
100	2259.9 ± 4.9	1583.1 ± 2.9	1541.4 ± 2.7	1252.2 ± 2.0
800	279759 ± 2040	181146 ± 1070	178926 ± 1050	111390 ± 510
1600	1445199 ± 14140	889770 ± 6830	888993 ± 6820	514745 ± 3000
$z \pm \sigma_z \sqrt{\chi^2}$	2.324 ± 0.007	2.282 ± 0.002	2.290 ± 0.004	2.165 ± 0.007
$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.051 ± 0.002	0.0433 ± 0.0005	0.041 ± 0.001	0.059 ± 0.002
χ^2 (d.f.=1)	6.73	1.13	2.81	16.6

N	τ_{int,A_N}^a	τ_{int,B_N}^a	τ_{int,C_N}^a
100	977.5 ± 1.4	855.2 ± 1.1	619.20 ± 0.70
800	105564 ± 474	93417 ± 394	66372 ± 237
1600	509831 ± 2960	449491 ± 2450	319529 ± 1470
$z \pm \sigma_z \sqrt{\chi^2}$	2.254 ± 0.003	2.258 ± 0.002	2.251 ± 0.003
$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.0303 ± 0.0004	0.0260 ± 0.0002	0.0195 ± 0.0003
χ^2 (d.f.=1)	2.84	0.69	4.06

Tabella 6.5: Tempi integrati di autocorrelazione e relativo fit (l'errore è una deviazione standard).

^a τ_{int,A_N} indica il tempo di autocorrelazione per l'osservabile $\frac{R_g^2}{\langle R_g^2 \rangle} - \frac{R_e^2}{\langle R_e^2 \rangle}$, τ_{int,B_N} per l'osservabile $\frac{R_m^2}{\langle R_m^2 \rangle} - \frac{R_e^2}{\langle R_e^2 \rangle}$ e τ_{int,C_N} per l'osservabile $\frac{R_g^2}{\langle R_g^2 \rangle} - \frac{R_m^2}{\langle R_m^2 \rangle}$.

N	τ_{exp,R_g^2}	τ_{exp,R_e^2}	τ_{exp,R_m^2}	$\tau_{exp,\mathcal{E}}$
100	2580 ± 30	2610 ± 30	2585 ± 20	2415 ± 20
800	306500 ± 8000	303000 ± 5000	310000 ± 4000	296000 ± 4000
1600	1584000 ± 10000	1420000 ± 10000	1510000 ± 10000	1465000 ± 10000
$b \pm \sigma_b \sqrt{\chi^2}$	2.316 ± 0.007	2.272 ± 0.008	2.298 ± 0.004	2.311 ± 0.004
$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.060 ± 0.003	0.075 ± 0.004	0.066 ± 0.002	0.058 ± 0.002
χ^2 (d.f.=1)	1.98	2.93	0.438	0.032
N	τ_{exp,A_N}^a	τ_{exp,B_N}^a	τ_{exp,C_N}^a	$A_{\mathcal{E}}$
100	2325 ± 30	2230 ± 20	2150 ± 20	0.375 ± 0.008
800	297500 ± 4000	272000 ± 4000	257000 ± 4000	0.268 ± 0.010
1600	1300000 ± 20000	1170000 ± 20000	1250000 ± 20000	0.257 ± 0.010
$b \pm \sigma_b \sqrt{\chi^2}$	2.298 ± 0.040	2.279 ± 0.032	2.297 ± 0.006	-0.145 ± 0.015
$A \pm \sigma_A \sqrt{\chi^2}$	0.060 ± 0.015	0.062 ± 0.011	0.055 ± 0.002	0.72 ± 0.06
χ^2 (d.f.=1)	35.2	29.5	0.232	1.22

Tabella 6.6: Tempi esponenziali di autocorrelazione e relativo fit (l'errore è una deviazione standard).

	R_g^2	R_e^2	R_m^2	\mathcal{E}
b	2.315 ± 0.015	2.30 ± 0.02	2.31 ± 0.02	2.31 ± 0.02
a	0.001 ± 0.0005	0.009 ± 0.004	0.01 ± 0.005	0.07 ± 0.01
	A_N	B_N	C_N	
b	2.30 ± 0.02	2.29 ± 0.02	2.29 ± 0.02	
a	0.025 ± 0.010	0.015 ± 0.008	0.019 ± 0.008	

Tabella 6.7: Esponenti a, b ottenuti mediante il rescaling delle funzioni di autocorrelazione.

dell'algoritmo a causa dell'introduzione del test Metropolis e della minore probabilità di superamento del test di Self-Avoidance. Si osserva inoltre un aumento degli esponenti dinamici ($\Delta z_{int,\mathcal{E}} \approx 0.49$ per l'energia e $\Delta z_{int,R} \approx 0.10$ per i raggi) molto contenuto, a significare che l'algoritmo mantiene, come auspicato, una buonissima efficienza anche dopo l'introduzione dell'interazione.

Le stime per le frazioni di mosse effettivamente proposte (EffProp), le frazioni di accettazione del test di self-avoidance (SaFrac), le frazioni di accettazione del test Metropolis (MetFrac) e le probabilità di occorrenza di tre link consecutivi sono riportate in Tab. 6.8, 6.9. Come si vede, le frazioni SaFrac per le mosse (22) sono, come a $\beta = 0$, ancora maggiori di quelle per le mosse (0), anche se questa differenza va diminuendo al crescere di N . Per le frazioni MetFrac la situazione è invertita e rispecchia quanto aspettato intuitivamente: le mosse (22) spostano più siti delle mosse (0), variando così maggiormente l'energia ed avendo una probabilità minore di superare il test Metropolis.

6.3 Funzione di distribuzione della distanza estremo-estremo

Discutiamo per primo il caso di $f_w(\rho)$ (vedi pag. 97). Il calcolo della "probabilità di parete" $P_{N,w}(x)$ è immediato. Meno chiaro è il calcolo delle barre d'errore per questa quantità. Se i vari cammini fossero generati indipendentemente l'uno dall'altro e se $\hat{P}_{N,w}(x)$ fosse la stima di $P_{N,w}(x)$, l'errore sarebbe semplicemente (come già visto per il

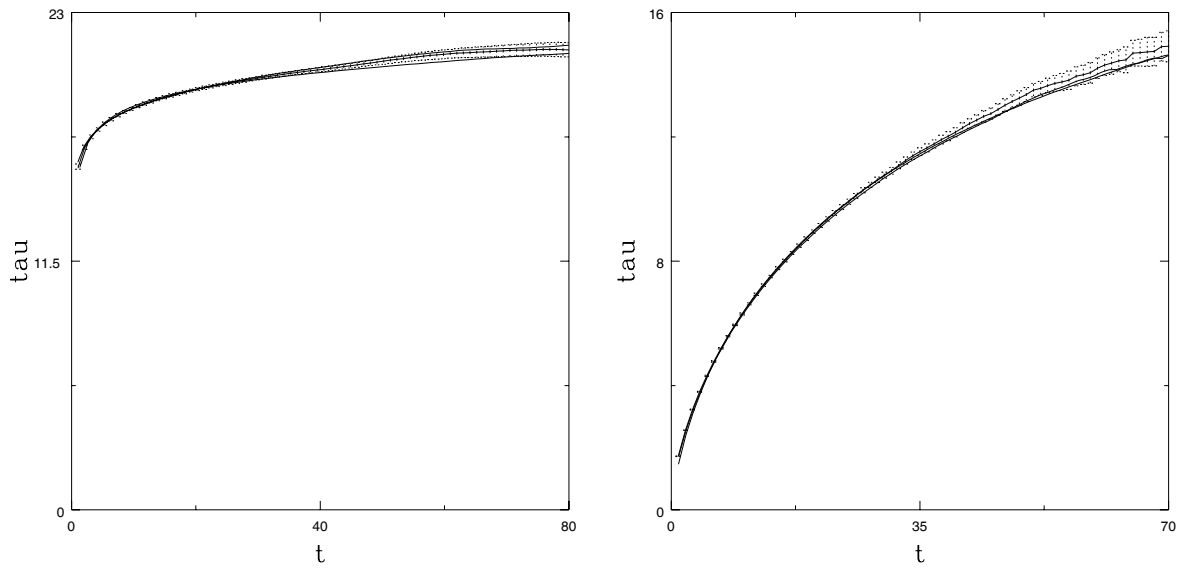


Figura 6.1: (a) Rescaling della funzione $\tau_{R_g^2}(t)$ e (b) rescaling della funzione $\tau_\varepsilon(t)$. Gli errori sono rappresentati solo per $N=800$.

N		P(0)	P(22)	Reptation
100	EffProp	0.4630897 ± 0.0000056	0.1578078 ± 0.0000043	1.0000000
	SaFrac	0.429261 ± 0.000019	0.525399 ± 0.000026	0.642604 ± 0.000033
	MetFrac	0.701463 ± 0.000014	0.610494 ± 0.000021	0.697444 ± 0.000018
800	EffProp	0.4623253 ± 0.0000025	0.1623367 ± 0.0000020	1.0000000
	SaFrac	0.393896 ± 0.000020	0.415598 ± 0.000045	0.566305 ± 0.000067
	MetFrac	0.7114370 ± 0.0000058	0.561480 ± 0.000018	0.662803 ± 0.000022
1600	EffProp	0.4619826 ± 0.0000022	0.1627760 ± 0.0000015	1.0000000
	SaFrac	0.388512 ± 0.000019	0.399399 ± 0.000043	0.551449 ± 0.000059
	MetFrac	0.7138517 ± 0.0000041	0.556063 ± 0.000013	0.657619 ± 0.000017

Tabella 6.8: Frazione di mosse effettivamente proposte (EffProp) e frazioni di accettazione per il test di self-avoidance (SaFrac) e per il test Metropolis (MetFrac)

$d = 2$	100	800	1600
I	0.1281050 ± 0.0000059	0.1277675 ± 0.0000021	0.1279769 ± 0.0000019
L	0.4586557 ± 0.0000054	0.4555669 ± 0.0000019	0.4554264 ± 0.0000013
U	0.1794773 ± 0.0000048	0.1821236 ± 0.0000021	0.1823272 ± 0.0000014
S	0.2337620 ± 0.0000055	0.2345420 ± 0.0000028	0.2342695 ± 0.0000024

Tabella 6.9: probabilità di occorrenza per le configurazioni di tre passi successivi del cammino.

caso delle frazioni di accettazione a pag. 80)

$$\left[\frac{1}{N_{MC}} \hat{P}_{N,w}(x)(1 - \hat{P}_{N,w}(x)) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6.9)$$

dove N_{MC} è il numero di iterazioni Monte Carlo. Nel nostro caso, comunque, le configurazioni non sono generate indipendentemente e bisogna quindi considerare il fatto che le stime $\hat{P}_{N,w}(x)$ per differenti valori di x sono correlate fra di loro. Si è così adottata una procedura *ad hoc* suggerita dal fatto che il numero di misure effettive nel calcolo della varianza (2.41) è ridotto a $N/2\tau_{int,A}$ (dove l'unità di tempo è la distanza fra due misure successive). Essa consiste nel moltiplicare semplicemente le barre d'errore per $\sqrt{2\tau_{R_{e,N}^2}}$, dove $\tau_{R_{e,N}^2}$ è il tempo integrato di autocorrelazione per la distanza estremo-estremo. A posteriori risulta che questa procedura sovrastima gli errori, ed infatti i valori del χ^2 per grado di libertà nei fit sono di solito molto piccoli. Per determinare il comportamento di $f_w(\rho)$ per grandi ρ si sono effettuati due tipi differenti di fit

$$\log(f_w(\rho)) = \log f_{w,\infty} - D\rho^\delta \quad (6.10)$$

$$\log(\rho^{1/6}f_w(\rho)) = \log f_{w,\infty} - D\rho^\delta \quad (6.11)$$

per $\rho \geq \rho_{min}$, per quattro differenti valori di ρ_{min} ($\rho_{min} = 2.5, 3, 3.5, 4$). Nel primo fit si è trascurato il fattore ρ^{σ_w} che appare nel comportamento asintotico di $f_w(\rho)$, mentre nel secondo si è usato per σ_w il valore predetto teoricamente usando l'eq. (5.67). I risultati sono riportati in Tab. 6.10. Come si vede le correzioni allo scaling sono molto forti per $N = 100$; osservando l'andamento dei parametri al variare di ρ_{min} risulta chiaro che il comportamento asintotico si ha solo per $\rho_{min} \gtrsim 3.5$. Nel contempo, per $\rho_{min} \gtrsim 4.0$ sopraggiunge un'instabilità dovuta alle maggiori fluttuazioni nell'istogramma costruito dai dati Monte Carlo e al minor numero di punti disponibili per il fit. In questa zona i parametri del fit oscillano e non danno più indicazioni utili. In definitiva sono stati utilizzati i risultati dei fit per $\rho_{min} = 3.5$ e $N \geq 800$. Effettuando una media pesata si ottiene dal primo fit

$$\delta = 2.325 \pm 0.028 \quad D = 0.167 \pm 0.007 \quad (6.12)$$

mentre dal secondo

$$\delta = 2.361 \pm 0.026 \quad D = 0.159 \pm 0.009 \quad (6.13)$$

Per la stima di $f_{w,\infty}$ non è possibile trascurare il fattore moltiplicativo ρ^{σ_w} e quindi solo il secondo fit può essere utilizzato. Da esso risulta

$$f_{w,\infty} = 0.309 \pm 0.012 \quad (6.14)$$

Per quanto riguarda l'esponente δ il valore previsto teoricamente al punto θ è $\delta = 7/3 = 2.3333\dots$. Bisogna però tenere conto anche del fatto che, da quanto visto nella sezione precedente, il valore di ν sembra allontanarsi da quello teorico all'aumentare di N . Considerando il valore di ν calcolato solo su $N = 800$ e 1600 ($\nu \simeq 0.5765$) si ottiene $\delta = 1/(1 - \nu) = 2.361$. Entrambi i valori di δ sono compatibili con quelli stimati dalle simulazioni Monte Carlo. L'accuratezza di queste ultime non è però sufficiente a dare indicazioni più precise sul valore effettivo di ν .

N		$f_w(\rho)$			$f_w(\rho)\rho^{1/6}$		
		$\rho_{min} = 3$	$\rho_{min} = 3.5$	$\rho_{min} = 4$	$\rho_{min} = 3$	$\rho_{min} = 3.5$	$\rho_{min} = 4$
100	δ	2.495 (20)	2.540 (30)	2.590 (40)	2.537 (20)	2.554 (40)	2.581 (50)
	D	0.134 (5)	0.122 (7)	0.114 (10)	0.123 (4)	0.116 (8)	0.110 (12)
	$f_{w,\infty}$	0.235 (5)	0.215 (8)	0.195 (12)	0.258 (5)	0.243 (8)	0.227 (12)
800	δ	2.370 (20)	2.290 (40)		2.397 (20)	2.350 (30)	2.345 (40)
	D	0.160 (6)	0.183 (12)		0.149 (8)	0.165 (12)	0.165 (15)
	$f_{w,\infty}$	0.260 (6)	0.300 (15)		0.281 (10)	0.324 (16)	0.325 (20)
1600	δ	2.365 (25)	2.360 (40)		2.420 (30)	2.390 (50)	
	D	0.156 (4)	0.160 (8)		0.140 (8)	0.150 (15)	
	$f_{w,\infty}$	0.250 (8)	0.260 (20)		0.265 (10)	0.285 (20)	

Tabella 6.10: Risultati dei fit di $f_w(\rho)$ e di $f_w(\rho)\rho^{1/6}$ con una forma del tipo $f_{w,\infty} \exp(-D\rho^\delta)$, per $\rho \geq \rho_{min}$ (i risultati mancanti sono dovuti all'eccessiva instabilità dei fit).

Consideriamo ora la funzione di distribuzione radiale $f(\rho)$ (vedi pag. 93). Per poter effettuare fit sulla stima Monte Carlo $\hat{P}_N(\mathbf{r})$ definita su reticolo ed estrarre informazioni sulle costanti che caratterizzano $f(\rho)$ (vedi Eq. (5.56)), è necessario calcolare la distribuzione di probabilità sotto forma di istogramma (che chiameremo $P_{hist,N}$) sommando i valori di $\hat{P}_N(\mathbf{r})$ su corone circolari concentriche. Questo è stato fatto in due diversi modi; nel primo si è mantenuto costante lo spessore della corona mentre nel secondo si è tenuta costante l'area. Nel primo caso $r_n = n\Delta r + r_0$; nel secondo $r_n^2 = n\Delta r^2 + r_1^2$ dove Δr e Δr^2 sono fissati empiricamente in modo da ottenere una definizione sufficientemente elevata mantenendo basse, allo stesso tempo, le fluttuazioni fra i vari canali. Definiamo

$$P_{hist,N}(n) = \frac{1}{2N_n} \sum_{\mathbf{r}: r_{n-1}^2 < r^2 \leq r_n^2} \hat{P}_N(\mathbf{r}) \quad (6.15)$$

dove N_n è il numero di punti del reticolo, appartenenti alla corona circolare $r_{n-1}^2 < r^2 \leq r_n^2$, per i quali la somma delle coordinate ha la stessa parità del numero di link del cammino ed il fattore 2 tiene conto del fatto che $\sum_n N_n$ corrisponde alla metà dei siti del reticolo. In pratica questo procedimento corrisponde a dividere per il numero totale di punti appartenenti alla corona circolare effettuando poi una correzione per tenere in conto il fatto che, all'interno della corona, il numero dei punti “pari” può essere anche molto diverso dal numero di punti “dispari”. Questo elimina, nell'istogramma, le fluttuazioni dovute alla struttura granulare del reticolo (ma non quelle di natura statistica, ovviamente).

$P_{hist,N}$ ha la proprietà che

$$\sum_n P_{hist,N}(n) 2N_n = \sum_n \left[\frac{1}{2N_n} \sum_{\mathbf{r}: r_{n-1}^2 < r^2 \leq r_n^2} \hat{P}_N(\mathbf{r}) \right] 2N_n = 1, \quad (6.16)$$

che è l'analogo discreto di

$$\int_{\mathbf{R}^d} d^d \mathbf{r} P_N(\mathbf{r}) = 1; \quad (6.17)$$

essa ci assicura che la normalizzazione f_∞ ottenuta dai fit corrisponda a quella definita nel limite continuo.

N		$f^{(1)}(\rho)$				$f^{(2)}(\rho)$			
		Δr	$\rho_{min} = 3$	$\rho_{min} = 3.5$	$\rho_{min} = 4$	Δr^2	$\rho_{min} = 3$	$\rho_{min} = 3.5$	$\rho_{min} = 4$
100	δ	0.0625	2.555 (20)	2.590 (40)	2.552 (50)	1	2.561 (20)	2.585 (40)	2.545 (50)
	D		0.118 (5)	0.112 (8)	0.119 (12)		0.118 (5)	0.112 (8)	0.122 (12)
	f_∞		0.0645 (25)	0.0605 (40)	0.0655 (80)		0.0640 (25)	0.0612 (40)	0.0668 (60)
800	δ	0.3	2.381 (20)	2.350 (35)	2.345 (50)	5	2.361 (30)	2.281 (55)	2.295 (70)
	D		0.153 (7)	0.162 (10)	0.163 (15)		0.158 (10)	0.182 (20)	0.180 (30)
	f_∞		0.0720 (20)	0.0766 (40)	0.0774 (80)		0.0737 (50)	0.0871 (75)	0.086 (10)
	δ	0.4	2.390 (20)	2.365 (35)	2.333(50)	20	2.367 (30)	2.315 (50)	2.265 (70)
	D		0.151 (6)	0.158 (10)	0.165 (15)		0.155 (8)	0.165 (15)	0.192 (30)
	f_∞		0.0715 (20)	0.0705 (35)	0.0802 (50)		0.0715 (35)	0.0795 (75)	0.097 (15)
	δ	0.5	2.388 (20)	2.364 (35)	2.340 (50)	64	2.383 (30)	2.331 (45)	2.298 (65)
	D		0.151 (6)	0.158 (10)	0.158 (15)		0.152 (8)	0.167 (15)	0.181 (22)
	f_∞		0.0715 (25)	0.0751 (40)	0.0759 (80)		0.0722 (35)	0.0810 (75)	0.089 (13)
1600	δ	0.75	2.392 (20)	2.375 (35)		128	2.380 (30)	2.335 (50)	
	D		0.150 (8)	0.156 (12)			0.152 (6)	0.168 (10)	
	f_∞		0.0706 (40)	0.0742 (75)			0.0715 (25)	0.0798 (50)	
	δ	1	2.385 (20)	2.345 (30)		256	2.385 (30)	2.340 (45)	
	D		0.150 (6)	0.163 (10)			0.150 (8)	0.165 (12)	
	f_∞		0.0710 (25)	0.0775 (50)			0.0700 (25)	0.0791 (50)	

Tabella 6.11: Risultati dei fit di $f(\rho)$ con una forma del tipo $f_{w,\infty} \exp(-D\rho^\delta)$, per $\rho \geq \rho_{min}$ (i risultati mancanti sono dovuti all'eccessiva instabilità dei fit). L'apice si riferisce al modo con cui è stato calcolato l'istogramma (spessore o area costante rispettivamente per 1 o 2).

I fit di $P_{hist,N}(r)$ risultano, come auspicabile, poco sensibili alle scelte di Δr e Δr^2 . Nel caso di $f(\rho)$ il valore previsto teoricamente per σ è 0. Si è quindi effettuato un fit del tipo

$$\log f(\rho) = \log f_\infty - D\rho^\delta \quad (6.18)$$

per diversi valori di ρ_{min} , dove la stima di $f(\rho)$ è stata fatta nei due modi descritti precedentemente. I risultati sono riportati in Tab. 6.11.

Nuovamente, le correzioni allo scaling sono molto forti per $N = 100$ e, osservando l'andamento dei parametri al variare di ρ_{min} , si può constatare che il comportamento asintotico sopraggiunge per $\rho_{min} \gtrsim 3.5$. Adesso però, gli istogrammi contengono un numero maggiore di punti che nel caso della probabilità “di parete”. Per $N = 800$ le fluttuazioni per grandi ρ nel caso di $f^{(1)}(\rho)$ sono dello stesso ordine di grandezza che nel caso di $f_w(\rho)$ ed i fit sono abbastanza stabili anche per $\rho_{min} = 4.0$. Nel caso di $f^{(2)}(\rho)$ (calcolata mantenendo l'area delle corone circolari costante), le fluttuazioni sono invece più elevate, e di nuovo, per $\rho_{min} = 4.0$, il fit tende ad essere instabile. Per $N = 1600$ la statistica non è sufficientemente grande da permettere fit per ρ così elevati. Utilizzando i risultati dei fit per $\rho_{min} = 3.5$ e $N \geq 800$ ed effettuando una media pesata si ottiene dal fit di $f^{(1)}(\rho)$

$$\delta = 2.359 \pm 0.016 \quad D = 0.160 \pm 0.005 \quad f_\infty = 0.0760 \pm 0.0025 \quad (6.19)$$

mentre da quello di $f^{(2)}(\rho)$

$$\delta = 2.322 \pm 0.023 \quad D = 0.168 \pm 0.006 \quad f_\infty = 0.0805 \pm 0.0030 \quad (6.20)$$

Utilizzando i risultati dei fit di $f^{(1)}(\rho)$ per $\rho_{min} = 4$ e $N = 800$ si ha

$$\delta = 2.339 \pm 0.029 \quad D = 0.162 \pm 0.009 \quad f_\infty = 0.0785 \pm 0.0035 \quad (6.21)$$

Tali risultati sono in accordo con quelli della probabilità “di parete” e, come essi, suggeriscono, senza però dare indicazioni definitive, che l’esponente effettivo δ per cammini di lunghezza $N = 800 - 1600$ abbia un valore $\delta \simeq 2.34 - 2.36$. Alla luce di quest’incertezza sul valore effettivo di δ risulta difficile la stima di D e di f_∞ con accuratezza superiore a quella qui ottenuta dato che sarebbe necessario effettuare fit a due soli parametri liberi, fissando δ ad un valore sufficientemente preciso. Allo stesso tempo risulta impossibile anche una stima precisa dei fattori S_M^* ed S_Z^* , in termini dei quali sono espressi D e f_∞ . Infatti, come si vede dalle (5.59), (5.60), S_M^* e S_Z^* dipendono da D e f_∞ e, in modo non semplice, anche da ν e γ . La propagazione degli errori darebbe quindi risultati non particolarmente significativi. Una stima indicativa può comunque essere fatta a partire dai valori di D e f_∞ ricavati in precedenza e dai valori teorici $\nu = 4/7$ e $\gamma = 8/7$. Assumendo $D \simeq 0.164$ e $f_\infty \simeq 0.0785$ si ottiene $S_M^* \approx 1.03$ e $S_Z^* \approx 0.886$. Un controllo si ha utilizzando la relazione (5.68) che permette il calcolo di $f_{w,\infty}$ da f_∞ e S_M^* . Dalle stime appena viste si ottiene $f_{w,\infty} = 0.318$, risultato compatibile con la (6.14). Contrariamente a quanto accade per il SAW, S_Z^* risulta piuttosto differente dall’unità (valore che caratterizza il comportamento gaussiano) mentre S_M^* vale uno a meno di correzioni dell’ordine di 10^{-2} (10^{-4} per il SAW). Si è infine effettuato un fit per determinare σ e f_∞ fissando il valore di δ e D . Il valore dei parametri risulta però molto instabile, ed in particolare quello di σ cambia segno al crescere di ρ_{min} . Questi risultati non danno quindi stime indicative ma, in ogni caso, sono compatibili con il valore teorico $\sigma = 0$ e con quello ottenuto nella precedente analisi $f_\infty \simeq 0.0785$.

Si è infine controllata la forma di scala (5.23) per la funzione $P_N(\mathbf{r})$ e l’analoga (5.65) per $P_{N,w}(\mathbf{r})$ che possono essere riscritte nella forma

$$P_N(\mathbf{r}) = \frac{1}{N^{2\nu}} \tilde{f}\left(\frac{|\mathbf{r}|}{N^\nu}\right) \quad \text{e} \quad P_{N,w}(x) = \frac{1}{N^\nu} \tilde{f}_w\left(\frac{|x|}{N^\nu}\right). \quad (6.22)$$

La sovrapposizione delle funzioni di distribuzione ad $N = 100, 800, 1600$ opportunamente riscalate è mostrata in Fig. 6.2.

Da questa si nota che le curve ad $N = 800$ e $N = 1600$ (linee tratteggiate) si sovrappongono perfettamente mentre per quella ad $N = 100$ (linea continua) ci sono forti correzioni allo scaling. Questo conferma in pieno l’analisi effettuata mediante fit e giustifica l’esclusione dei loro risultati per $N = 100$ nel computo delle medie pesate.

In conclusione presentiamo i risultati ottenuti per la probabilità che un estremo sia primo vicino del cammino stesso. Le stime ottenute dalle simulazioni sono riportate in Tab. 6.12. In accordo con quanto visto a pag. 98, è stato eseguito un fit con la funzione $a + bN^{-\alpha}$ dove α dovrebbe rappresentare la stima per l’esponente $\nu(\theta^1 + d) - 1$ nel caso $\beta = 0$, $d = 2$. Nei casi $\beta = 0$, $d = 3$ e $\beta = 0.665$, $d = 2$ si è risolto il sistema di equazioni per determinare i vari parametri e si sono propagati gli errori mediante le formule ottenute per essi. I risultati sono riportati in Tab. 6.13.

In $d = 2$ e $\beta = 0$ si noti che il valore di α non è consistente con il risultato teorico (5.78). Ciò è dovuto alla presenza di correzioni allo scaling la cui forma generale è mostrata pag. 16). Nel caso della probabilità (EndPNN), il calcolo teorico di Saleur-Duplantier [48] mostrato a pag. 98 tiene conto della sola correzione non analitica con

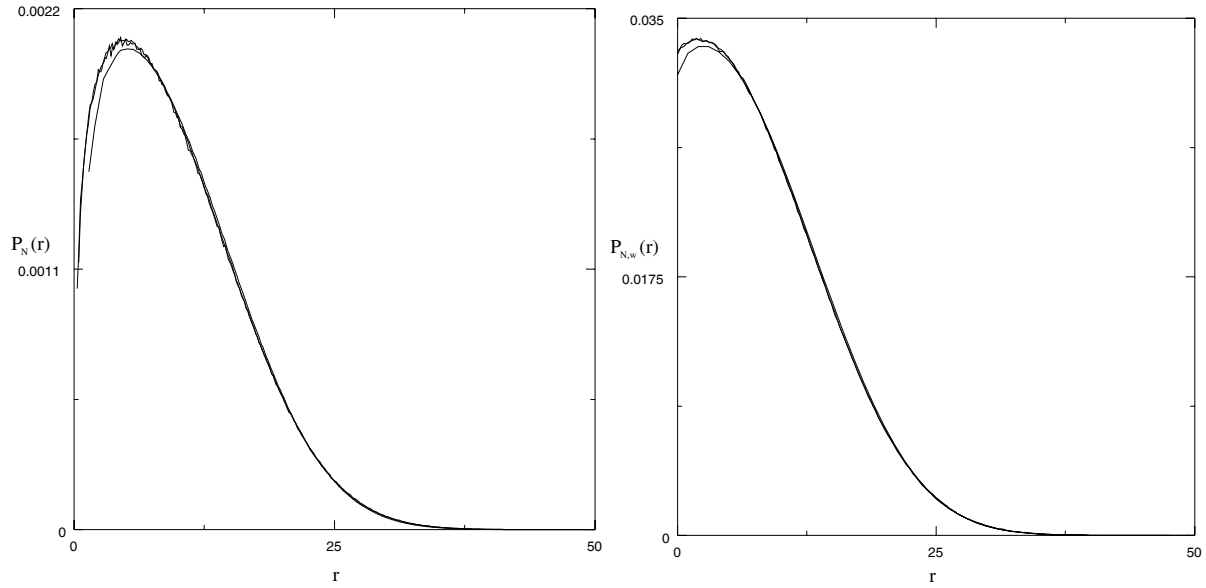


Figura 6.2: Rescaling delle funzioni di distribuzione $P_N(\mathbf{r})$ (1) e $P_{N,w}(\mathbf{r})$ (2) per $N = 100$ (linea continua), $N = 800$ e $N = 1600$ (linee tratteggiate). La sovrapposizione si ha per $\nu \approx 0.572$

d	100	300	700	1000
2	0.282503 ± 0.000033	0.286753 ± 0.000039	0.288129 ± 0.000320	0.288310 ± 0.000131

d	100	300	1000
3	0.248648 ± 0.000042	0.252060 ± 0.000042	0.253302 ± 0.000124

	100	800	1600
2	0.633075 ± 0.000050	0.715773 ± 0.000143	0.731608 ± 0.000167

Tabella 6.12: Probabilità che un estremo del cammino sia primo vicino del cammino stesso (EndPNN): le prime due tabelle si riferiscono al caso $\beta = 0$; la terza a $\beta = 0.665$.

	$\beta = 0$ $d = 2$	$\beta = 0$ $d = 3$	$\beta = 0.665$ $d = 2$
a	0.28905 ± 0.00028	0.25387 ± 0.00027	0.7837 ± 0.0024
b	-0.00338 ± 0.00032	-0.00267 ± 0.00032	-0.1155 ± 0.0027
α	0.953 ± 0.077	0.965 ± 0.098	0.383 ± 0.010

Tabella 6.13: Stime dei parametri a, b, α per la probabilità che un estremo sia primo vicino del cammino (EndPNN). I risultati per $\beta = 0$ e $d = 2$ sono stati ottenuti mediante fit con $\chi^2 = 0.111$ ($d.f. = 1$) e livello di significatività del 73.9%.

esponente $\nu(\theta^1 + d) - 1$; oltre ad essa sarà però sicuramente presente almeno la correzione analitica proporzionale ad $1/N$. Se, come nel caso $d = 2, \beta = 0$, l'esponente $\nu(\theta^1 + d) - 1$ è maggiore di 1 ($9/8 = 1.125$ in tale caso), nel limite $N \rightarrow \infty$ dominerà la correzione analitica (in assenza di altre correzioni non analitiche con esponenti minori di 1). Questo è in perfetto accordo con quanto evidenziato dai nostri risultati ($\alpha = 0.953 \pm 0.077$).

In $d = 3$ e $\beta = 0$ non esistono stime precise per θ^1 . I nostri risultati sembrano comunque evidenziare nuovamente la correzione analitica in $1/N$ e permettono di escludere i valori di θ^1 significativamente più piccoli di $\hat{\theta}^1 \equiv (\frac{\alpha+1}{\nu} - d) \simeq 0.34$ che darebbero un termine più rilevante di quello osservato ($\alpha = 0.965 \pm 0.098$).

Infine, in $d = 2$ e $\beta = 0.665$, il valore di $\nu(\theta^1 + d) - 1$ previsto teoricamente è $8/21 = 0.3809 \dots$ che, essendo decisamente più piccolo di 1, prevale sulle correzioni analitiche. Le nostre simulazioni sono in perfetto accordo con tale risultato e non evidenziano alcuna correzione non-analitica con esponente più piccolo di $8/21$.

6.4 Tensore di Girazione e forma dei polimeri

La tipica forma di un polimero non è sferica. Definiamo, per un generico cammino aleatorio ω di N passi in \mathbf{R}^d , il tensore di girazione Q come

$$Q_{\alpha,\beta} = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^N (\omega_{i,\alpha} - \omega_{j,\alpha})(\omega_{i,\beta} - \omega_{j,\beta}) \quad (6.23)$$

con la proprietà che

$$R_g^2 = \text{Tr}Q = \sum_{\alpha=1}^d q_\alpha \equiv d \bar{q} \quad (6.24)$$

dove q_α $\alpha = 0, \dots, d$ sono gli autovalori del tensore e R_g^2 è il raggio di girazione. Per caratterizzare la forma di una configurazione è interessante considerare rapporti degli autovalori come ad esempio l'asfericità \mathcal{A}_d

$$\mathcal{A}_d = \frac{1}{d(d-1)} \sum_{\alpha=0}^d \frac{(q_\alpha - \bar{q})^2}{\bar{q}^2}, \quad (6.25)$$

che è zero per conformazioni con tutti gli autovalori uguali $q_\alpha = \bar{q}$, e assume il valore massimo 1 per una catena completamente lineare in cui tutti gli autovalori sono 0 eccetto uno. \mathcal{A}_d caratterizza quindi la deviazione dalla forma sferica. Un'altro semplice rapporto è

$$S_d = \frac{(q_1 - \bar{q})(q_2 - \bar{q}) \cdots (q_d - \bar{q})}{\bar{q}^d} \quad (6.26)$$

che distingue la forma prolata da quella oblata in $d = 3$. In $d = 2$ comunque S_d e \mathcal{A}_d sono uguali a parte il segno. Mediante argomenti di gruppo di rinormalizzazione (vedi per esempio [53]). Si può dimostrare che i valori medi di \mathcal{A}_d e S_d e le relative funzioni di distribuzione sono universali nel limite $N \rightarrow \infty$.

Per quanto riguarda gli autovalori q_α , ci si aspetta che i loro valori medi abbiano un comportamento del tipo

$$\langle q_\alpha \rangle_N \simeq B_\alpha N^{2\nu} \text{ per } N \rightarrow \infty, \quad (6.27)$$

N	$\langle q_1 \rangle_N$	$\langle q_2 \rangle_N$	$\langle q_2/q_1 \rangle_N$	$\langle \mathcal{A}_2 \rangle$
100	35.5398 ± 0.0079	7.89562 ± 0.00085	0.294316 ± 0.000065	0.376641 ± 0.000084
800	386.746 ± 0.291	85.8734 ± 0.0325	0.294928 ± 0.000212	0.375619 ± 0.000274
1600	861.11 ± 0.87	190.432 ± 0.097	0.294101 ± 0.000279	0.376846 ± 0.000363

Tabella 6.14: Stime per i valori medi delle grandezze che caratterizzano la forma di un polimero al punto θ .

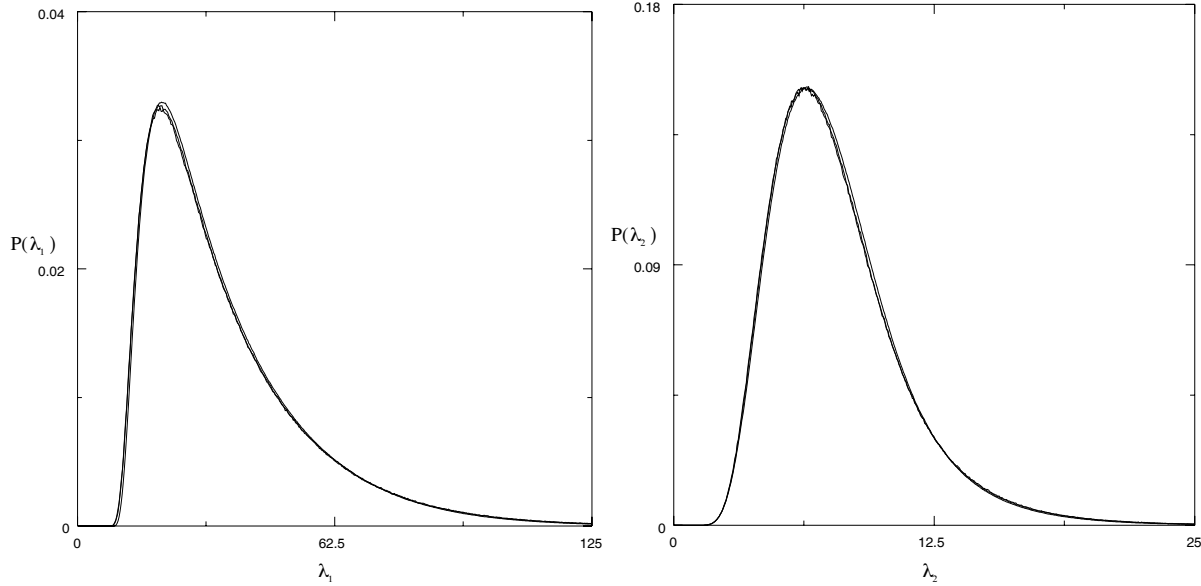


Figura 6.3: Rescaling delle funzioni di distribuzione degli autovalori q_1 (1) e q_2 (2) del tensore di girazione per $N = 100$ (linea continua), $N = 800$ e $N = 1600$ (linee tratteggiate). La sovrapposizione si ha per $2\nu \approx 1.1485$

(dove ν è l'esponente critico del raggio di girazione) e che le loro funzioni di distribuzione abbiano una forma di scala

$$P_{\alpha,N}(q_\alpha) = \frac{1}{\langle q_\alpha \rangle_N} F\left(\frac{q_\alpha}{\langle q_\alpha \rangle_N}\right) \simeq \frac{1}{N^{2\nu}} F'\left(\frac{q_\alpha}{N^{2\nu}}\right). \quad (6.28)$$

Veniamo adesso ai risultati numerici delle simulazioni a $\beta = 0.665$. I risultati per i valori medi delle quantità sopra elencate sono riportati in Tab. 6.14.

I fit di $\langle q_\alpha \rangle_N$ secondo la legge $B_\alpha N^{2\nu_\alpha}$ danno: $B_1 = 0.1791 \pm 0.0008$, $\nu_1 = 0.5744 \pm 0.0010$ con $\chi^2 = 11.1$ ($d.f. = 1$) e $B_2 = 0.03996 \pm 0.00003$, $\nu_2 = 0.5740 \pm 0.0002$ con $\chi^2 = 1.57$ ($d.f. = 1$), dove, nella stima degli errori per il primo caso, si è tenuto conto dell'elevato valore del χ^2 . Questi valori di ν sono in perfetto accordo con quello riportato in Tab. 6.1 per il raggio di girazione. Si noti che le correzioni per le quantità universali $\langle q_2/q_1 \rangle_N$ e $\langle \mathcal{A}_2 \rangle$ hanno un comportamento non monotono, causato probabilmente dal sovrapporsi delle correzioni allo scaling e degli effetti di cross-over.

Si è infine controllata la forma di scala (6.28) per le funzioni di distribuzione degli autovalori, e l'indipendenza da N delle analoghe funzioni per \mathcal{A}_2 e per q_2/q_1 . La sovrapposizione, per ciascuna grandezza studiata, delle tre funzioni di distribuzione ad $N = 100, 800, 1600$ opportunamente riscalate, è mostrata in Fig. 6.3, 6.4.

Per le funzioni di distribuzione di q_1 e di q_2 la sovrapposizione si ottiene per valori di 2ν dell'ordine di 1.1485 e si possono notare lievi correzioni allo scaling per la funzione

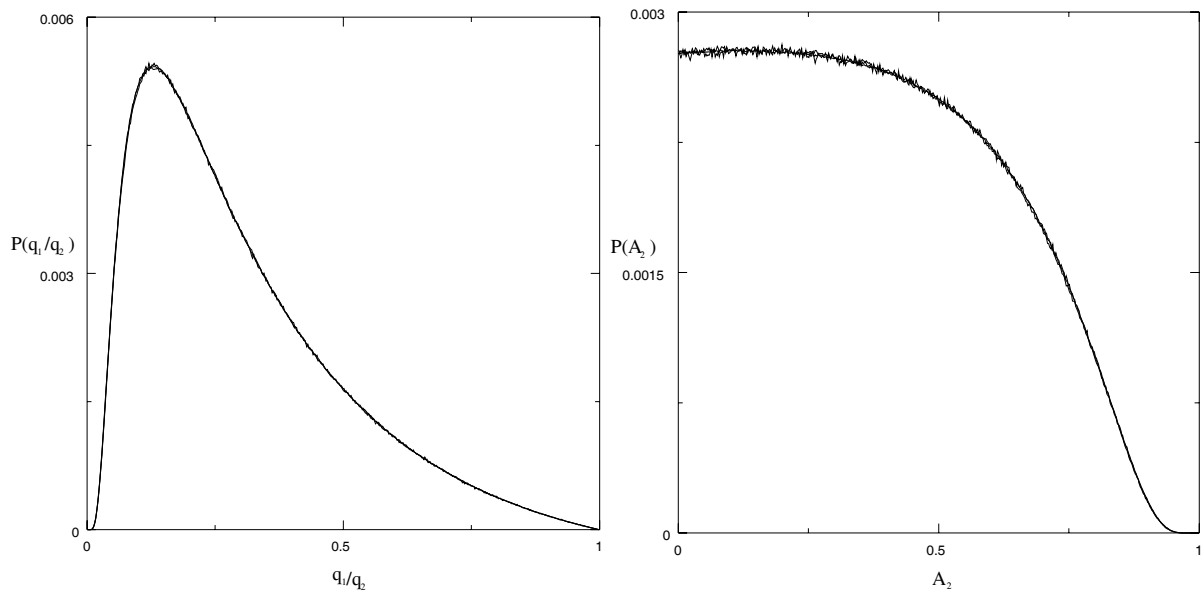


Figura 6.4: Sovrapposizione delle funzioni di distribuzione del rapporto q_1/q_2 (1) e dell' asfericità (2) per $N = 100$ (linea continua), $N = 800$ e $N = 1600$ (linee tratteggiate).

ad $N = 100$ (linea continua) non presenti per quelle ad $N = 800$ e $N = 1600$ (linee tratteggiate), che si sovrappongono perfettamente. Queste correzioni non sono invece osservabili, a causa di cancellazioni che sopraggiungono quando si considerano rapporti di autovalori, nel caso delle funzioni di distribuzione di q_1/q_2 e dell' asfericità A_2 .

Conclusioni e prospettive

Riassumiamo brevemente i risultati originali ottenuti in questa tesi e contenuti nei capitoli 3,4,6.

Nel capitolo 3 è stata dimostrata l'ergodicità per

1. algoritmo *Bilocal* in $d = 2$; basato su kink-transport + one-bead flip + rotazione di 90° o 180° di un estremo
2. algoritmo *Satyr* in $d \geq 2$; basato su kink-end e end-kink reptation
3. algoritmo *Reptation modificato* in $d = 2$; basato su kink-transport + one-bead flip + reptation

Come si è detto a pag. 46, l'algoritmo Bilocal sembra non essere ergodico in $d = 3$ ed un probabile esempio di configurazione congelata è il nodo di Fig 2.10. Essa presenta un elevato numero di links ($N = 18$) quindi, un modo per verificare la validità di tale congettura, è quello di eseguire un'enumerazione mediante computer che elenchi tutte le possibili configurazioni raggiungibili e che si fermi quando non riesca a crearne di nuove. Se l'algoritmo non è ergodico, ci si aspetta che la classe di ergodicità di questa configurazione non sia molto grande. Infatti, se da essa se ne ottiene una simile, ma in cui sia presente anche una sola kink, il nodo può essere sciolto immediatamente.

Per quanto riguarda Reptation modificato, non si ha, dalla dimostrazione in $d = 2$, nessuna informazione utile in $d = 3$ dove l'esistenza di configurazioni congelate per l'algoritmo Bilocal e di altre congelate per Reptation, suggeriscono la probabile esistenza di cammini congelati anche per l'algoritmo in esame. In questo caso, è molto più difficile trovare un esempio di configurazione congelata, dato che essa deve avere gli estremi intrappolati (per Reptation) e non deve contenere kink (per Bilocal). Dovrà quindi contenere dei nodi ed essere compatta, in modo che gli estremi vi rimangano intrappolati e che le mosse (0) non riescano a formare delle kink. In alternativa potrebbero esistere classi di ergodicità composte da molte configurazioni, ed in questo caso la dimostrazione della non ergodicità risulterebbe ancora più difficile. Tutto ciò evidenzia la necessità di ulteriori studi.

Nel capitolo 4 sono state effettuate simulazioni con gli algoritmi Bilocal + Reptation e Bilocal + Satyr. Riguardo al primo, è stata sottolineata la differenza fra esponente critico dinamico del tempo integrato e del tempo esponenziale, nel caso di osservabili come l'energia ($z_{int,\varepsilon} \approx 1.7$ sia in due che in tre dimensioni, mentre $z_{exp,\varepsilon} \approx 2.15$ in $d = 2$ e $z_{exp,\varepsilon} \approx 2.03$ in $d = 3$). Nel caso dei raggi $z_{int} \approx 2.2$ in $d = 2$ e $z_{int} \approx 2.05$ in $d = 3$. In due dimensioni le correzioni allo scaling causano una diversità fra z_{int} e z_{exp} molto meno visibile che in tre dimensioni. Per i rapporti universali invece $z_{int} \approx z_{exp} \approx 2.16$ in $d = 2$ e $z_{int} \approx z_{exp} \approx 2.03$ in $d = 3$. Per tutte le osservabili, ad eccezione dei raggi in due

dimensioni, le funzioni di autocorrelazione del Monte Carlo soddisfano perfettamente la legge di scaling dinamico sull'intervallo di tempi a disposizione. I valori dei due parametri che permettono la sovrapposizione contemporanea delle curve riscalate sono in pieno accordo con i valori degli esponenti critici ottenuti dai fit.

Per quanto riguarda l'algoritmo Bilocal+Satyr si osserva, sia nel caso dei raggi che dei rapporti universali, $z_{int} \approx z_{exp} \approx 2.85$; in media questi esponenti dinamici sono quindi molto più elevati che per l'algoritmo precedente. Il ragionamento euristico di pag. 41 porta, in questo caso, ad una conclusione nettamente errata. Per l'energia, Bilocal + Satyr ($z_{int,\varepsilon} \approx 1.23$) è più efficiente di Bilocal + Reptation. La funzione di autocorrelazione decade, però, molto lentamente ($\rho_\varepsilon(t) \sim 1/t^{\approx 1}$) nella regione accessibile ai nostri dati e, al di fuori di essa, fino a valori di t dell'ordine del tempo esponenziale; per tenere in conto questo fatto nel computo di τ_{int} , si deve ipotizzare il tipo di comportamento della coda nella regione di grandi tempi non accessibile. Tale approssimazione non permette, comunque, di valutare in modo chiaro gli errori sistematici che essa stessa comporta.

In definitiva, Bilocal+Reptation risulta chiaramente il migliore dei due, e si è quindi deciso di utilizzarlo nelle simulazioni in presenza di interazione. Per quanto riguarda Bilocal+Satyr, va sottolineato che esso è costruito in maniera tale che uno dei due estremi del cammino rimanga sempre fisso. Questo suggerisce un suo impiego in problemi di polimeri in interazione con superfici, dove algoritmi come Reptation perderebbero molta della loro efficienza.

Nel capitolo 6, per mezzo dell'algoritmo Bilocal + Reptation, è stata effettuata una simulazione in $d = 2$ per l'ISAW, scegliendo il valore dell'interazione in modo da situarsi nelle immediate vicinanze del punto θ . L'algoritmo si comporta molto bene e l'innalzamento degli esponenti dinamici rispetto al caso senza interazione, è abbastanza modesto per le osservabili che misurano l'estensione media di un SAW e per i loro rapporti universali. Per quanto riguarda l'energia l'esponente del tempo integrato aumenta di ≈ 0.5 avvicinandosi decisamente a quello del tempo esponenziale (uguale al corrispondente per i raggi $z_{int} \approx z_{exp} \approx 2.31$). Abbiamo già detto che in presenza di interazione il "pivot", essendo altamente non locale, perde gran parte della sua efficienza. In definitiva, l'algoritmo da noi sviluppato risulta essere uno dei migliori disponibili per lo studio di osservabili globali in presenza di interazione.

La stima di ν sembra indicare che l'esponente effettivo si allontani dal valore previsto teoricamente, al crescere di N , invece che avvicinarsi (come nel caso in cui siano presenti solo le correzioni allo scaling). Questo può essere causato dall'effetto di cross-over che per N sufficientemente grandi diventa prima o poi rilevante per qualsiasi valore dell'interazione diverso dal valore critico. Di conseguenza, la stima scelta dal lavoro di Grassberger [49] ($\beta = 0.665 \pm 0.002$) non sembra essere la migliore possibile. Negli altri lavori in letteratura a noi noti, si ottengono valori di β più bassi di questo, mentre le nostre simulazioni indicano che β dovrebbe essere più grande. Ciò è sicuramente dovuto al fatto che in tali lavori si utilizzano cammini di poche centinaia di passi (vedi ad esempio [50]), per i quali gli effetti di cross-over (contrariamente alle correzioni allo scaling) non sono ancora visibili. Sarebbe quindi interessante effettuare simulazioni ad N più elevati (una ad $N = 3200$ è già in corso di realizzazione); in secondo luogo si potrebbe effettuare un "reweighting" dei dati raccolti per calcolare le medie dei raggi a valori di β leggermente più grandi, determinando così un intervallo di valori possibili per il β critico da confrontare con quello riportato nel lavoro [49].

Nello stesso capitolo si è mostrato come lo studio della funzione di distribuzione della distanza estremo-estremo sia in buon accordo con la stima di ν effettivo per le lunghezze dei cammini utilizzati. Una volta individuato con precisione sufficientemente elevata il valore critico di β , si potrebbero eseguire nuove simulazioni per lo studio di questa funzione di distribuzione, permettendo una determinazione più accurata delle costanti f_∞ e D (e perciò anche di S_M^* e S_Z^*), per le quali non esiste nessuna stima teorica.

Per concludere sono stati esposti i risultati riguardanti le grandezze che caratterizzano la forma di un ISAW (che in media non è sferica). Nel caso dell'ISAW non esistono predizioni teoriche, mentre esistono calcoli con l' ε -expansion per il SAW, grazie ai quali si ricava una stima di $\langle \mathcal{A}_d \rangle$ e di $\langle S_d \rangle$ in $d = 3$ (vedi [53]). Un analoga stima, potrebbe essere fatta per il punto θ , sempre in $d = 3$, utilizzando la corrispondenza con la teoria $\lambda\phi^6$, a cui si è accennato nel capitolo 5. Questi risultati potrebbero essere poi confrontati con i risultati di simulazioni in tre dimensioni, dove però, anche in questo caso, il valore critico di β è noto solo da simulazioni numeriche.

Bibliografia

- [1] B.Duplantier and H.Saleur, Phys. Rev. Lett. **59**, 539 (1987)
- [2] P.J.Flory, *Principles of polymer chemistry*, (Cornell University Press, Itahaca, 1971)
- [3] P.G.de Gennes, *Scaling concepts in polymer physics*, (Cornell University Press, Itahaca, 1980)
- [4] J.des Cloizeaux and G.Jannink, *Polymers in solution*, (Claredon Press, Oxford, 1990)
- [5] P.G.de Gennes, Phys. Lett. **38A**, 339 (1972)
- [6] J.L.Cardy and H.Saleur, J. Phys. **A22**, L601 (1989)
- [7] S.Caracciolo, A.Pelissetto and A.D. Sokal, J. Phys. **A23**, L969 (1990)
- [8] F.J.Wegner, Phys.Rev. **B5**, 4529 (1972)
- [9] B.G.Nickel, Macromolecules **24**, 1358 (1991)
- [10] J.des Cloizeaux, Phys.Rev A10, 1665 (1974)
- [11] B.Li, N.Madras and A.D.Sokal, J.Stat.Phys. **80**, 661 (1995)
- [12] N.Madras and G.Slade, *The Self-Avoiding Walk*, (Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, 1993)
- [13] A.Pelissetto and E.Vicari, *Four-point renormalized coupling constant and Callan-Symanzik β -function in $O(N)$ models*, submitted to Nucl.Phys **B**
- [14] P.Belohorec and B.G.Nickel, *Accurate universal and two-parameter model results from a Monte Carlo renormalization group study*, Guelph report (September 1997)
- [15] S.Caracciolo, M.S.Causo and A.Pelissetto, Phys.Rev. **E57** (Rap. Comm.), R1215 (1998)
- [16] B.Nienhuis, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, vol.11, ed. C.Domb e J.L. Lebowitz (Academic Press, London, 1987)
- [17] J.L.Cardy and H.W.Hamber, Phys.Rev.Lett. **45**, 499 (1980)
- [18] M.N.Rosenbluth and A.W.Rosenbluth, J.Chem.Phys. **23**, 356 (1955)
- [19] K.Suzuki, Bull.Chem.Soc.Japan **41**, 538 (1968)

- [20] N.Metropolis, M.N.Rosenbluth, A.W.Rosenbluth, A.H.Teller and E.Teller, J.Chem.Phys. **21**, 1087 (1953)
- [21] W.K.Hastings, Biometrika **57**, 97 (1970)
- [22] A.Berretti and A.D.Sokal, J.Stat.Phys. **40**, 483 (1985)
- [23] P.C.Hohenberg and B.I.Halperin, Rev.Mod.Phys. **49**, 435 (1977)
- [24] N.Madras and A.D.Sokal, J.Stat.Phys. **50**, 109 (1988)
- [25] N.Madras and A.D.Sokal, J.Stat.Phys. **47**, 573 (1987)
- [26] J.Reiter, Macromolecules **23**, 3811 (1990)
- [27] A.D.Sokal, non pubblicato (1993)
- [28] B.Berg and D.Foerster, Phys.Lett. **B106**, 323 (1981)
- [29] C.Araçao de Carvalho, S.Caracciolo and J.Fröhlich, Nucl.Phys. **B215**, 209 (1983)
- [30] C.Araçao de Carvalho and S.Caracciolo, J.Phys. **44**, 323 (1983)
- [31] D.C.Rapaport, J.Phys. **A18**, 113 (1985)
- [32] P.G.de Gennes, Phys.lett. **36**, L55 (1975)
- [33] M.J.Stephen and J.L.McCauley, Phys.Lett. **A44**, 89 (1973)
- [34] R.Vilanove and Rondelez, Phys.Rev.Lett. **45**, 1502 (1980)
- [35] A.Weinrib and S.A.Trugman, Phys.Rev. **B31**, 2993 (1985)
- [36] A.Coniglio, N.Jam, I.Majid and E.Stanley, Phys.Rev. **B35**, 3617 (1987)
- [37] B.Duplantier and H.Saleur, Phys.Rev.Lett. **58**, 2325 (1987)
- [38] B.Duplantier, J.Phys. **A19**, L1009 (1986)
- [39] D.S.McKenzie and M.A.Moore, J.Phys. **A4**, L82 (1971)
- [40] M.E.Fisher, J.Chem.Phys. **44**, 616 (1966)
- [41] M.E.Fisher and B.J.Hiley, J.Chem.Phys. **34**, 1253 (1961)
- [42] P.H.Verdier and W.H.Stockmayer, J.Chem.Phys. **36**, 227 (1962)
- [43] F.T.Wall, S.Windwer and R.J.Gans, J.Chem.Phys. **38**, 2220 (1963)
- [44] S.Caracciolo, M.S.Causo and A.Pelissetto, *Analitic and numerical results for the distribution function of the self-avoiding walks*, in preparazione.
- [45] M.E.Fisher and R.J.Burford, Phys.Rev. **156**, 583 (1967)
- [46] M.E.Fisher and A.Aharony, Phys.Rev.Lett. **31**, 1238 (1973); Phys.Rev. **B7**, 2818 (1974)

- [47] J.Mazur, J.Chem.Phys. **43**, 4354 (1965)
- [48] B.Duplantier and H.Saleur, Phys. Rev. Lett. **62**, 2641 (1989)
- [49] P.Grassberger and R.Hegger, J.Phys. **I5** (Paris), 597 (1995)
- [50] H.Meirovitch and H.A.Lim, J.Chem.Phys. **91**, 2544 (1989)
- [51] P.M.Lam, Phys.Rev. **B36**, 6988 (1987)
- [52] A.L.Owczarek, T.Prellberg, D.Bennett-Wood and A.J.Guttman, J.Phys. **A27**, L919 (1994)
- [53] O.Jagodzinski, E.Eisenriegler and K.Kremer, J.Phys. **I2** (Paris), 2243 (1992)