

# Проект №19455 "Решетчатые модели макромолекул"

Пчелинцев Илья Игоревич, БПМ-195

## Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>2</b>
1.1	Одномерная модель Изинга . . . . .	2
1.2	Статсумма цепи Изинга общего случая ( $h, J \neq 0$ ) : периодич. гран. условия и Трансфер-матрица	2
1.3	Диагонализация Трансфер-матрицы . . . . .	3
1.4	Статсумма цепи Изинга общего случая ( $h, J \neq 0$ ) : открытые гран. условия . . . . .	3
1.5	Итоги . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Средняя намагниченность случая <math>h = 0</math></b>	<b>5</b>
2.1	Периодические гран. условия . . . . .	5
2.2	Открытые гран. условия . . . . .	5
2.3	Магнитная восприимчивость . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Средняя энергия</b>	<b>7</b>
3.1	Проверка случая $J = 0$ . . . . .	7
3.2	Случай $h = 0$ . . . . .	8
3.3	Сравнение средней энергии моделей с периодичным и открытым гран. условиями . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Теплоёмкость на спин при <math>h = 0</math></b>	<b>9</b>
4.1	Открытое гран. условие . . . . .	9
4.2	Периодическое гран. условие . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Свободная энергия</b>	<b>11</b>
<b>6</b>	<b>Разница между открытым и периодичным случаем</b>	<b>12</b>
6.1	Средняя энергия системы (равное число спинов) . . . . .	12
6.2	Средняя энергия системы (равное число рёбер) . . . . .	13
6.3	Теплоёмкость системы (равное число рёбер) . . . . .	13
6.4	Квадрат намагниченности системы (равное число рёбер) . . . . .	14
<b>7</b>	<b>Сравнение решения одномерной модели Изинга с расчётами Монте-Карло</b>	<b>15</b>
<b>8</b>	<b>Поведение модели Изинга на блужданиях без самопересечений вблизи крит. температуры</b>	<b>16</b>
8.1	Расчёты крит. экспонент при наблюдении коллапса данных . . . . .	17
8.2	Определение погрешностей измерений экспонент . . . . .	17
<b>9</b>	<b>Модель Изинга на прямоугольной решётке</b>	<b>19</b>
9.1	Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга . . . . .	19
9.2	Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий . . . . .	20
9.3	Связь тензора инерции и тензора вращения . . . . .	22
9.4	Показатели формы блуждания из тензора вращения . . . . .	23
9.5	Свойства моделей вблизи фазового перехода с учётом показателей формы . . . . .	24
<b>10</b>	<b>Оценка работы алгоритма для трёхмерной модели Изинга</b>	<b>27</b>
10.1	Расчёт магнитных свойств . . . . .	27
10.2	Расчёт долей узлов с 2-6 соседями . . . . .	27

# 1 Введение

## 1.1 Одномерная модель Изинга

Модель Изинга представляет собой решетку, в узлах которой расположены магнитные моменты, направленные "вверх" или "вниз" чему соответствует значение "спина" на  $j$ -ом месте в решетке.

$$\sigma_j = \pm 1$$

Энергией взаимодействия внешнего поля с моделью будем считать сумму взаимодействий поля  $h$  с каждым из  $N$  моментов со спином  $\sigma_j$

$$H_h = - \sum_{j=1}^N h \sigma_j \quad (1.1)$$

Внутренним взаимодействием между двумя соседними моментами считаем:

$$H_J = - \sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j \quad (1.2)$$

Тогда Гамильтонианом системы из  $N$  спинов будет:

$$H = -h \sum_{j=1}^N \sigma_j - J \sum_{(i,j)} (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \dots + \sigma_{N-1} \sigma_N) \quad (1.3)$$

## 1.2 Статсумма цепи Изинга общего случая $(h, J \neq 0)$ : периодич. гран. условия и Трансфер-матрица

Для поиска решения данного случая воспользуемся методом **трансфер-матриц**.

Для начала перепишем формулу (1.3) в другой форме:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} \quad (1.4)$$

Учитывая периодические гран. условия  $(\sigma_{N+1} = \sigma_1)$ , то формулы (1.3) и (1.4) тождественно равны.

Тогда статсумма такой модели будет равна:

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N \exp(\beta J \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{1}{2} \beta h (\sigma_j + \sigma_{j+1})) = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \quad (1.5)$$

Где  $T(\sigma_j, \sigma_{j+1})$  - трансфер-матрица для двух соседних моментов. Поскольку один момент принимают лишь два значения  $(\pm 1)$ , а пара - уже четыре -  $(1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1)$  - то, их матрица представляет с собой матрицу с элементами, соответствующими этим парам значений:

$$T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta h) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta h) \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

Если рассмотреть сумму произведений двух соседних матриц от  $j-1$ ,  $j$  и  $j+1$  внутри цепи при всевозможных значениях моментов, мы получим:

$$\sum_{\sigma=\pm 1} T(\sigma_{j-1}, \sigma_j) T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = T^2(\sigma_{j-1}, \sigma_{j+1})$$

### 1.3 Диагонализация Трансфер-матрицы

Попробуем диагонализировать Трансфер-матрицу ( $T = RT^D R^{-1}$ ), тогда полное произведение матриц будет:

$$\sum_{\sigma} \prod_j^N T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = R(T^D)^N R^{-1}(\sigma_1, \sigma_{N+1} = \sigma_1)$$

Диагонализированная матрица будет выглядеть как:

$$T^D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

$$(T^D)^N = \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

Найдём собственные значения  $\lambda_{\pm}$  и их собственные вектора:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm Q$$

$$Q = \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta h) - 2 \sinh(2\beta J)}$$

$$R = \begin{pmatrix} e^{\beta J} \lambda_{+2} & e^{\beta J} \lambda_{-2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2e^{\beta J} Q} & 1 - \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \\ -\frac{1}{2e^{\beta J} Q} & \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

$$\lambda_{\pm 2} = e^{\beta J} \sinh(\beta h) \pm Q$$

Эти формулы понадобятся нам позднее.

Поскольку нам нужен инвариантный след данной матрицы, т.к. матрица зависит от одного элемента, то достаточно  $Z = Tr(T^D)^N$

Таким образом:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.11)$$

### 1.4 Статсумма цепи Изинга общего случая ( $h, J \neq 0$ ) : открытые гран. условия

Расчёт статсуммы в данном случае сложнее, т.к. система не замкнута, и крайние значения не имеют внутреннего взаимодействия между собой. Попробуем воспользоваться формулой (1.4) с корректировкой под открытые условия:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} - \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_N) \quad (1.12)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^{N-1} \exp(\beta J \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{1}{2} \beta h (\sigma_j + \sigma_{j+1})) \exp(\frac{1}{2} \beta h (\sigma_1 + \sigma_N)) =$$

$$= \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^{N-1} T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) T'(\sigma_1, \sigma_N)$$

Где  $T'(\sigma_1, \sigma_N)$  - трансфер-матрица для крайних моментов. От ранее рассмотренных матриц она отличается отсутствием внутреннего взаимодействия, поэтому она представима в виде:

$$T(\sigma_1, \sigma_N) = \begin{pmatrix} \exp(\beta h) & 1 \\ 1 & \exp(-\beta h) \end{pmatrix}$$

К полному произведению применимы те же рассуждения, что и в периодическом случае: воспользовшись диагонализацией трансфер-матрицы  $T$ , мы получим:

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_j^{N-1} T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) T'(\sigma_1, \sigma_N) = R(T^D)^{N-1} R^{-1} T'(\sigma_1, \sigma_N)$$

Просуммировав элементы матрицы, полученной из данного произведения, мы получим:

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} \left( \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) - \lambda_-^{N-1} \left( \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h \right) \quad (1.13)$$

## 1.5 Итоги

Нам известна статсумма модели для общего случая:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

- для периодичного граничного условия

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} \left( \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) - \lambda_-^{N-1} \left( \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h \right)$$

- для открытого погран. случая, где

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm Q$$

$$Q = \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta h) - 2 \sinh(2\beta J)}$$

## 2 Средняя намагниченность случая $h = 0$

По предыдущим расчетам мы знаем формулу ср. намагниченности, с самого начала считая  $J = 0$ . С одной стороны, по определению среднего:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{ZN} \int S e^{-\beta H}, H = -h \sum_{j=1}^N \sigma_j = -hS \quad (2.1)$$

где  $S$  - сумма всех моментов в цепи. С другой стороны:

$$\frac{1}{ZN} \int S e^{-\beta H} = \frac{\partial \text{Log}[Z_{J=0}]}{\partial h} \frac{1}{\beta N} = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} \quad (2.2)$$

В этом случае  $Z$  берется сразу при условии ( $J = 0$ ), её гамильтонианом для  $N$  спинов при периодичном и открытом гран. условии будет (1.1), а статсуммой будет формула (30.8) при (30.10) из учебника Свендсена [1]:

$$Z_{J=0} = (2 \cosh \beta h)^N \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial h} = \beta N 2^N (\cosh \beta h)^{N-1} \sinh \beta h \quad (2.4)$$

Следовательно, при подстановке в (2.2), получим:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \tanh(\beta h) \quad (2.5)$$

Применим эту операцию для статсуммы общего случая. Для упрощения задачи будем рассматривать случай  $h = 0$ .

### 2.1 Периодичные гран. условия

Перед этим для простоты найдём производные всех составляющих статсумм:

$$(Q)'_h = \frac{1}{2\sqrt{e^{2\beta J} \cosh(\beta h)^2 - 2 \sinh(2\beta J)}} (e^{2\beta J} 2 \cosh(\beta h) \sinh(\beta h) \beta) \quad (2.6)$$

и при ( $h = 0$ ) = 0

Тогда:

$$(\lambda_{\pm})'_h = e^{\beta J} \sinh(\beta h) \beta \pm (Q)'_h \quad (2.7)$$

и при ( $h = 0$ ) так же = 0

Таким образом:

$$\langle \sigma_{PVC} \rangle = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \frac{1}{Z\beta N} (N \lambda_+^{N-1} (\lambda_+)'_h + \lambda_-^{N-1} (\lambda_-)'_h) = 0 \quad (2.8)$$

### 2.2 Открытые гран. условия

Найдём дополнительные значения составляющих  $Z_{OVC}$

$$Q_{h=0} = e^{-\beta J}$$

Также найдём значения  $\lambda_{\pm}$  при  $h = 0$

$$\lambda_{\pm(h=0)} = e^{\beta J} \pm \sqrt{e^{2\beta J} - (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J})} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J} \quad (2.9)$$

Тогда  $\lambda_{+(h=0)} = 2 \cosh \beta J$  и  $\lambda_{-(h=0)} = 2 \sinh \beta J$

Рассмотрим производную  $Z_{OVC}$  по  $h$ , учитывая дифференцирование произведения и все полученные ранее результаты ((2.6), (2.7), (2.9))

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial h} = & \lambda_+^{N-1} \left( \frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} + \beta \sinh \beta h \right) - \\ & - \lambda_-^{N-1} \left( \frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} - \beta \sinh \beta h \right) =_{h=0} 0 \quad (2.10) \end{aligned}$$

Следовательно,  $\langle \sigma_{OBC} \rangle = 0$

### 2.3 Магнитная восприимчивость

Мы выяснили, что средняя намагничённость одномерной цепи при любом гранич. условии равна нулю. Рассмотрим в таком случае магнитную восприимчивость  $X = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial h}$

Учитывая формулу намагничённости (2.1) и то, что первая производная статсуммы (2.10) равна нулю:

$$X = \left( \frac{1}{Z\beta} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)'_h = \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \left( -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} \right) = \frac{1}{Z\beta} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2}$$

После расчётов, представленных в .nb файле (раздел 21.10.2020 (поиск X)) получим:

$$X = \frac{\beta}{2} (2N e^{2\beta J} - e^{4\beta J} + 1) + \frac{\beta}{2} \tanh^{N-1} \beta J (e^{4\beta J} - 2e^{2\beta J} + 1)$$

Подстановка  $T = 0, \infty$  приведёт к одинаковому результату и обратной зависимости от  $T$ , что говорит о парамагнетических свойствах одномерной модели Изинга.

### 3 Средняя энергия

Чтобы удостовериться в правильности полученной формулы для статсуммы общего случая открытого гран. условия (1.13), проверим её на предельных условиях ( $h = 0$ ,  $J = 0$ ), поскольку они были рассмотрены в учебнике [1].

Нам известна формула средней энергии:

$$\langle U \rangle = -\frac{\partial \text{Log}[Z]}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (3.1)$$

Предварительно будет нелишним найти значения составных частей формулы и их производных по  $\beta$

$$\begin{aligned} \lambda'_{\pm} &= e^{\beta J} J \cosh \beta h + e^{\beta J} \sinh \beta h \, h \pm \\ &\pm \frac{1}{Q} (e^{2\beta J} J \cosh \beta h + e^{2\beta J} \cosh \beta h \sinh \beta h \, h - \cosh 2\beta J \, 2J) \end{aligned}$$

В виду большого числа различных значений, составим таблицу всех составных значений в формуле.

	$\lambda_+$	$(\lambda_+)'_{\beta}$	$\lambda_-$	$(\lambda_-)'_{\beta}$	$Q$	$(Q)'_{\beta}$
$h = 0$	$2 \cosh \beta J$	$2J \sinh \beta J$	$2 \sinh \beta J$	$2J \cosh \beta J$	$e^{-\beta J}$	$-J e^{-\beta J}$
$J = 0$	$2 \cosh \beta h$	$2h \sinh \beta h$	$0$	$0$	$\cosh \beta h$	$h \sinh \beta h$

Таблица 1: Производные составных значений статсумм

#### 3.1 Проверка случая $J = 0$

Теперь можно перейти к проверке по предельным случаям.

$$Z_{OBC}(h = 0) = 2^{N-1} \cosh \beta J^{N-1} (0 + 1 + 1) - 2^{N-1} \sinh \beta J^{N-1} (0 + 1 - 1) = 2^N \cosh \beta J^{N-1}$$

$$\begin{aligned} Z_{OBC}(J = 0) &= 2^{N-1} \cosh \beta h^{N-1} \left( \frac{(\sinh \beta h)^2 + 1}{\cosh \beta h} + \cosh \beta h \right) = \\ &= 2^{N-1} \cosh \beta h^{N-1} \left( \frac{(\cosh \beta h)^2}{\cosh \beta h} + \cosh \beta h \right) = \\ &= 2^N \cosh \beta h^N \end{aligned}$$

Как и ожидалось, статсуммы совпали с расчетами учебника [1], что говорит о правильности формулы. Чтобы сильнее убедиться в этом, найдём формулы средней энергии.

Для  $J = 0$  заранее учтём, что правое слагаемое формулы статсуммы и её производной обнулится:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial \beta} &= \lambda_+^{N-1} \left( \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h ((J \sinh \beta h + 2h \cosh \beta h) Q - (Q)'_{\beta} \sinh \beta h)}{Q^2} - \right. \\ &\left. - \frac{JQ + (Q)'_{\beta}}{e^{\beta J} Q^2} + h \sinh \beta h \right) + \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_{\beta} (N-1) \left( \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) \end{aligned}$$

При подстановке  $J=0$  мы получим  $2^N (\cosh \beta h)^{N-1} N \sinh \beta h$

И в конечном счёте формула средней энергии системы при  $J=0$ :

$$\langle U_{J=0} \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -N h \tanh \beta h$$

Данная формула полностью совпадает с расчётами в учебнике [1], что говорит о правильности формулы для статсуммы обобщенного случая.

### 3.2 Случай $h = 0$

Из проделанных ранее расчётов для средней энергии системы при случае  $h = 0$ , используя соответствующую статсумму, мы получили следующую формулу:

$$\langle U_{h=0} \rangle = -J(N-1) \tanh \beta J$$

Попробуем вывести ту же формулу через статсумму общего случая.

Начнём со статсуммы:

$$Z_{OBC}(h=0) = \lambda_+^{N-1}(0+1+1) - \lambda_-^{N-1}(0+1-1) = 2^N (\cosh \beta J)^{N-1}$$

Поскольку формула производной статсуммы увеличится в два раза из-за ненулевых  $\lambda_-$  и  $(\lambda_-)'_\beta$  рассмотрим их сомножители, заранее учитывая их отличие лишь в знаке правого  $\cosh \beta h$ . Назовём их  $A_+$  и  $A_-$ .

Так, при подстановке в производную как  $+$ , так и  $-$   $h=0$  получим ноль. А при подстановке  $h=0$  в сами сомножители, получим:

$$A_{+(h=0)} = 2$$

$$A_{-(h=0)} = 0$$

Таким образом, наша формула  $\frac{\partial Z}{\partial \beta}_{h=0}$  сократилась в 4 раза и равна:

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta}_{h=0} = (N-1) \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta 2 = J(N-1) 2^N (\cosh \beta J)^{N-1} \sinh \beta J$$

Итоговая формула средней энергии будет:

$$\langle U_{h=0} \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -J(N-1) \tanh \beta J$$

### 3.3 Сравнение средней энергии моделей с периодичным и открытым гран. условиями

Найдём формулу средней энергии для случая с периодичным гран. условием для  $h = 0$ . Воспользовавшись формулой (1.11) для нахождения средней энергии через (3.1) и таблицей производных, получим:

$$\begin{aligned} \langle E_{PBC(h=0)} \rangle &= \frac{1}{Z_{PBC}(h=0)} \left( N \lambda_+^{N-1} (\lambda_+)'_\beta + N \lambda_-^{N-1} (\lambda_-)'_\beta \right) = \\ &= JN 2^N \sinh \beta J \cosh \beta J \frac{(\cosh \beta J)^{N-2} + (\sinh \beta J)^{N-2}}{(\cosh \beta J)^N + (\sinh \beta J)^N} = \\ &= JN 2^N \tanh \beta J \frac{1 + (\tanh \beta J)^{N-2}}{1 + (\tanh \beta J)^N} \approx JN 2^N \tanh \beta J \end{aligned}$$

$$\frac{1 + (\tanh x)^{N-2}}{1 + (\tanh x)^N} = \frac{1 + x^N \left( \frac{1}{x^2} + \left( \frac{2}{3} - \frac{n}{3} \right) + O(x) \right)}{1 + x^N \left( 1 - \frac{nx^2}{3} + O(x^3) \right)} \approx 1, \quad x \rightarrow 0, \quad 1, \quad x \rightarrow \infty$$



## 4 Теплоёмкость на спин при $h = 0$

Теперь, поскольку наша формула статсуммы  $Z_{OBC}$  (для крайних случаев) и её производная (для средних наблюдаемых) полностью верна, проверим правильность статсуммы до второй производной по  $\beta$  для нахождения теплоёмкости на спин  $S$  в случае нулевого поля.

### 4.1 Открытое гран. условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

$$c = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{N k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} \approx k_B \beta^2 J^2 (\text{sech} \beta J)^2 \quad (4.1)$$

Предыдущие вычисления уже показали правильность формулы средней энергии, однако для более полной проверки выразим  $U$  через статсумму, и следовательно:

$$-\frac{1}{N k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} = -k_B \beta^2 \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \left( -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) = k_B \beta^2 \frac{1}{N} \left( -\frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right)$$

Теперь для определения второй производной статсуммы перейдём к той же замене, как в конце предыдущего раздела:

$$\begin{aligned} Z_{OBC} &= \lambda_+^{N-1} A_+ - \lambda_-^{N-1} A_- \\ (Z_{OBC})'_\beta &= (N-1) \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta A_+ + \lambda_+^{N-1} (A_+)'_\beta - (N-1) \lambda_-^{N-2} (\lambda_-)'_\beta A_- - \lambda_-^{N-1} (A_-)'_\beta \end{aligned}$$

Т.к. мы знаем, что первые производные  $(A_\pm)'_\beta = 0$  и  $A_- = 0, A_+ = 2$ , то половина второй производной (вследствие производной произведения) обнулится. Будет лучше заранее найти значения вторых производных  $A$  и  $\lambda_\pm$  при  $h = 0$ .

$$\begin{aligned} (A_\pm)''_{\beta=h=0} &= 0 \\ (\lambda_\pm)''_{\beta=h=0} &= J^2 (e^{\beta J} \pm e^{-\beta J}) \end{aligned}$$

Таким образом, единственным необнулённым слагаемым второй производной будет первое и:

$$\begin{aligned} Z_{OBC} &= 2 \lambda_+^{N-1} \\ (Z_{OBC})'_\beta &= 2(N-1) \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta \\ (Z_{OBC})''_\beta &= 2(N-1) ((N-2) \lambda_+^{N-3} (\lambda_+)'_\beta{}^2 + \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta'') \end{aligned}$$

Раскрыв все  $\lambda_+$  и подставив в формулу теплоёмкости на спин, получим:

$$\begin{aligned} c &= k_B \beta^2 \left( 1 - \frac{1}{N} \right) \left( -(N-1) \left( \frac{(\lambda_+)'_\beta}{\lambda_+} \right)^2 + (N-2) \left( \frac{(\lambda_+)'_\beta}{\lambda_+} \right)^2 + \frac{(\lambda_+)'_\beta''}{\lambda_+} \right) = \\ &= k_B \beta^2 J^2 \left( 1 - \frac{1}{N} \right) \left( 1 - \left( \frac{\sinh \beta J}{\cosh \beta J} \right)^2 \right) \approx k_B \beta^2 J^2 (\text{sech} \beta J)^2 \end{aligned}$$

Формулы полностью совпали.

## 4.2 Периодическое гран. условие

Формула теплоёмкости на спин для данного условия отсутствует в учебнике, поэтому сравнить полученный результат с первоисточником не получится и к вычислениям данной формулы требуется особое внимание.

Начнём с формулы статсуммы:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N (1 + (\frac{\lambda_+}{\lambda_-})^N) =_{h=0} 2^N (\cosh \beta J)^N (1 + (\tanh \beta J)^N)$$

$$(Z_{PBC})'_\beta = N(\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)'_\beta + \lambda_-^{N-1}(\lambda_-)'_\beta) = JN2^N (\cosh \beta J)^{N-1} \sinh \beta J (1 + (\tanh \beta J)^{N-2})$$

$$\begin{aligned} (Z_{PBC})''_\beta &= N(\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)'')_\beta + (N-1)\lambda_+^{N-2}(\lambda_+)'_\beta{}^2 + \lambda_-^{N-1}(\lambda_-)'')_\beta + (N-1)\lambda_-^{N-2}(\lambda_-)'_\beta{}^2 = \\ &= 2^N NJ^2 (\cosh \beta J)^N (1 + (N-1)(\tanh \beta J)^2 + (N-1)(\tanh \beta J)^{N-2} + \tanh \beta J) \end{aligned}$$

Прошлые расчёты показали, что формула теплоёмкости на спин выражается через статсумму как:

$$c = \frac{k_B \beta^2}{N} \left( -\frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right)$$

В таком случае, при подстановке статсуммы и производных, мы получим:

$$c = k_B \beta^2 J^2 \left( 1 + (N-1) \tanh^2 \beta J \left( \frac{1 + \tanh^{N-4} \beta J}{1 + \tanh^N \beta J} \right) - N \tanh^2 \beta J \left( \frac{1 + \tanh^{N-2} \beta J}{1 + \tanh^N \beta J} \right)^2 \right)$$

В случае термодинамического предела, все дроби вида  $\frac{1+\tanh}{1+\tanh}$  стремятся к единице (есть небольшое отклонение, которое при увеличении N смещается вправо и одновременно уменьшается. Тогда в итоге:

$$c = k_B \beta^2 J^2 \operatorname{sech}^2 \beta J$$

## 5 Свободная энергия

Учитывая предыдущие вычисления, будет удобно проверить формулу другой величины - свободной энергии для случая  $h = 0$ . Для этого слегка преобразуем нашу статсумму:

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} A_+ (1 - (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{N-1} (\frac{A_-}{A_+}))$$

где

$$A_+ = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h$$
$$A_- = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h$$

Тогда свободная энергия для случая  $h=0$  будет равна:

$$F_{h=0} = k_B T \ln Z = k_B (N-1) \ln \lambda_+ + k_B T \ln A_+ + k_B T \ln (1 - (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{N-1} (\frac{A_-}{A_+}))$$

Ранее мы узнали все преобразования при  $h = 0$ :  $A_+ = 2$ ,  $A_- = 0$ , следовательно:

$$F_{h=0} = k_B T (N-1) \ln (2 \cosh \beta J) + k_B T \ln 2$$

Результаты снова совпали с формулой из учебника [1].

Тогда руководствуясь предыдущими расчётами для случая  $J=0$ , свободная энергия для данного случая (зная, что  $\lambda_+ = 2 \cosh \beta h$ ,  $\lambda_- = 0$ ,  $A_+ = 2 \cosh \beta h$ ) будет равна:

$$F_{J=0} = k_B T N \ln (2 \cosh \beta h)$$

## 6 Разница между открытым и периодичным случаем

Будем рассматривать разность между различными энергетическими величинами при разных случаях.

### 6.1 Средняя энергия системы (равное число спинов)

Найдём разность средней энергии открытого и периодичного случая:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial \text{Log}[Z_{OBC}]}{\partial \beta} + \frac{\partial \text{Log}[Z_{PBC}]}{\partial \beta} = -\frac{\partial \text{Log}[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}]}{\partial \beta} \quad (6.1)$$

$$\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}} = \frac{A_+ \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \frac{A_-}{A_+}\right)}{\lambda_+ \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)}$$

$$A_{\pm} = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} \pm \cosh \beta h$$

Учитывая что мы рассматриваем системы при  $N \rightarrow \infty$ , все скобки вида  $\text{Log}[1 + (<1)^N] \approx (<1)^N$   
Тогда

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial (\text{Log}[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}])}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left( \text{Log}[\frac{A_+}{\lambda_+}] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{A_-}{A_+} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1}\right) \right) \quad (6.2)$$

Перед тем, как продолжить расчёты, стоит заранее найти производные отношений  $\frac{\lambda_-}{\lambda_+}$  и  $\frac{A_-}{A_+}$ .  
Тогда производная их частного будет выглядеть как:

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} = \frac{(\lambda_-)'_{\beta} \lambda_+ - \lambda_- (\lambda_+)'_{\beta}}{\lambda_+^2}$$

Все значения для крайних случаев можно легко взять из нашей таблицы.

$$h = 0 : \frac{J}{\cosh^2 \beta J}$$

$$J = 0 : 0$$

Теперь перейдём к  $A_{\pm}$ . Поскольку они имеют одинаковые слагаемые, отличающиеся по знаку, то для упрощения можно представить их как:

$$A_{\pm} = A_0 \pm \cosh \beta h$$

Тогда при дифференцировании частного половина слагаемых в числителе сократится, а другая сложится:

$$\begin{aligned} \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} &= \frac{(A_-)'_{\beta} A_+ - A_- (A_+)'_{\beta}}{A_+^2} = \frac{(A'_0 - h \sinh \beta h)(A_0 + \cosh \beta h) - (A_0 - \cosh \beta h)(A'_0 + h \sinh \beta h)}{A_+^2} = \\ &= 2 \frac{A'_0 \cosh \beta h - A_0 h \sinh \beta h}{A_+^2} \end{aligned}$$

Формулу  $A'_0$  и значения  $A_{\pm}$  для предельных значений можно взять из расчётов производной статсуммы и средней энергии. При предельных случаях производная частного  $A_-$  и  $A_+$  обращается в ноль.

Теперь вернёмся к формуле (6.2) и продифференцируем всю скобку по  $\beta$

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} + \frac{(\lambda_+)'_{\beta}}{\lambda_+} + N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} - (N-1) \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-2} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+}\right) - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} \quad (6.3)$$

Рассмотрим все значения и значения производных по  $\beta$   $\lambda_+$  и  $A_+$  при  $h = 0$  и  $J = 0$  из таблицы. Путём подстановки в полученную формулу производной (6.3), получим:

$$h = 0 : J + JN \frac{(\tanh \beta J)^{N-1}}{(\cosh \beta J)^2} \approx_{N \rightarrow \infty} J^2$$

$$J = 0 : 0$$

## 6.2 Средняя энергия системы (равное число рёбер)

Рассмотрим теперь случай с равным числом рёбер - он достигается при сравнении моделей с периодическим гран. условием с  $N$  спинами и с открытым гран. условием с  $N+1$  спинами, тогда формула (6.2) станет:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left( \text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right) \right) \quad (6.4)$$

Все дополнительные расчёты производных мы сделали в предыдущем подразделе, поэтому перейдём к изменённой формуле, аналогичной (6.3), и затем сразу к предельным случаям:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} - N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} \quad (6.5)$$

$$h = 0 : JN \frac{(\tanh \beta J)^{N-1}}{(\cosh \beta J)^2} \approx_{N \rightarrow \infty} 0$$

$$J = 0 : -h \tanh \beta h$$

## 6.3 Теплоёмкость системы (равное число рёбер)

Формулу для теплоёмкости системы возьмём из (4.1) без деления на  $N$ :

$$c = \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \text{Log}[Z]}{\partial \beta^2} \quad (6.6)$$

Так как мы рассматриваем случай равных рёбер, то как и в прошлый раз, возьмём систему из  $N$  спинов для модели с периодическим гран. условием и систему из  $N+1$  спинов для модели с открытым гран. условием - таким образом мы получим вторую производную знакомого нам выражения из формулы (6.4):

$$c_{OBC}^{N+1} - c_{PBC}^N = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \text{Log}\left[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}\right] = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left( \text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right) \right) \quad (6.7)$$

Рассмотрим первые два слагаемых выражения в скобках по отдельности, чтобы не запутаться в расчётах:

$$(\text{Log}[A_+])''_{\beta} = \frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} - \left(\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+}\right)^2$$

$$\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right)\right)''_{\beta} =$$

---

2

$$\frac{(\tanh x)^{N-1}}{(\cosh x)^2} = x^{N-1} + o(x^N) \approx 0, x \rightarrow 0$$

$$= \frac{\rightarrow 1}{\rightarrow \infty} \approx 0, x \rightarrow \infty$$

$$= N(N-1)\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-2}\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'^2\left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + N\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1}\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)''_{\beta}\left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + 2N\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1}\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta}\left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\left(\frac{A_-}{A_+}\right)''_{\beta}$$

Все вспомогательные расчёты для предельных случаев были сделаны в Wolfram Mathematica (Проект2.pdf, Теплоёмкость) [2], поэтому пропустим этот шаг и перейдём к итоговым выражениям:

$$h = 0 : -N(N-1)J^2 \frac{(\tanh \beta J)^{N-2}}{(\cosh \beta J)^2}$$

$$J = 0 : 0$$

## 6.4 Квадрат намагниченности системы (равное число рёбер)

Формула среднего квадрата намагниченности во многом схожа с формулой теплоёмкости при предельных случаях. С одной стороны, по определению средней наблюдаемой величины, квадрат намагниченности представима в виде:

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} M^2 e^{-\beta H}, \quad (6.8)$$

где  $H$  - гамильтониан системы (1.3).

С другой стороны:

$$\frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} M^2 e^{-\beta H} = \frac{1}{\beta^2} \left( \frac{\partial^2 \log Z}{\partial h^2} + \left( \frac{\partial \log Z}{\partial h} \right)^2 \right) = \langle M^2 \rangle \quad (6.9)$$

Правое слагаемое в скобке является квадратом средней намагниченности, который при предельных случаях равна нулю, поэтому нам достаточно только левого. Это значит, что в формуле разности будет то же самое выражение под знаком дифференцирования, что и в формулах (6.4) и (6.7). Опять же, мы берём  $N+1$  спин для открытого условия, и  $N$  для периодического. Тогда:

$$\langle M_{OBC}^2 \rangle - \langle M_{PBC}^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \text{Log} \left[ \frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}} \right] = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \left( \text{Log}[A_+] + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \left( \frac{A_-}{A_+} - 1 \right) + o\left( \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \right) \quad (6.10)$$

Воспользуемся расчётами Wolfram Mathematica (Проект2.pdf, Квадрат намагниченности), и получим:

$$h = 0 : \frac{1}{2}(2e^{2\beta J} - e^{4\beta J} + 1) + 2N(\tanh \beta J)^N - 2e^{2\beta J}(\sinh \beta J)^2(\tanh \beta J)^N$$

$$J = 0 : 1 - (\tanh \beta J)^2$$

## 7 Сравнение решения одномерной модели Изинга с расчётами Монте-Карло

Для сравнения значений наблюдаемых из решения для одномерной модели Изинга и расчётов методом Монте-Карло были рассмотрены значения средней энергии на спин, удельной теплоёмкости, и среднего квадрата намагниченности на спин с формулами соответственно:

$$\begin{aligned}\langle U \rangle &= \beta J \left(1 - \frac{1}{N}\right) \tanh \beta J \\ c &= (\beta J)^2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) (\operatorname{sech} \beta J)^2 \\ \langle m^2 \rangle &= \left(\frac{e^{2\beta J} - 1}{N}\right)^2 (\tanh \beta J)^{N-1} + 2 \frac{e^{2\beta J}}{N} + \frac{1 - e^{4\beta J}}{n^2}\end{aligned}$$

(Расчёт последней формулы описан в Проект7.1.pdf [2])

Были проведены расчёты для длин от 250 до 10000, сейчас полученные данные находятся в обработке.

## 8 Поведение модели Изинга на блужданиях без самопересечений вблизи крит. температуры

Критическая область - одна из сложнейших областей для изучения поведения любой термодинамической модели, как для теоретическим, так и экспериментальным способом. В частности, есть предположение, что модель Изинга на блужданиях без самопересечений вблизи крит. температуры (далее Изинг-блуждание) вблизи крит. температуры показывает схожесть в поведении с фазовым переходом жидкой/парообразной системы в области тройной точки, что даёт интересный повод для изучения данной области и расчётов критических экспонент с помощью симуляций Монте-Карло.

Определим приведённую температуру  $t$  как "расстояние" от критической температуры:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C} \quad (8.1)$$

$T$  - текущая температура модели,  $T_C$  - критическая температура. Тогда корреляционная длина при термодинамическом пределе (системе бесконечной длины) в критической области будет:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (8.2)$$

где  $\nu$  - критическая экспонента

Также мы можем определить другие экспоненты - к примеру, в нормальной модели Изинга определяются экспоненты  $\gamma$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  для магнитной восприимчивости, теплоёмкости и намагниченности соответственно:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (8.3)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (8.4)$$

$$m \sim |t|^{-\beta} \quad (8.5)$$

Рассмотрим случай квадрата намагниченности:

$$m^2 \sim |t|^{-2\beta} \quad (8.6)$$

Воспользовавшись (8.2), избавимся от  $t$ :

$$m^2 \sim \xi^{2\beta/\nu} \quad (8.7)$$

учитывая поведение корреляционной длины в конечноразмерных системах (книга "Monte Carlo Methods in Statistical Physics график 4.1 и стр. 232-233) [3], мы можем представить функцию квадрата намагниченности в виде:

$$m^2 = \xi^{-2\beta/\nu} m_{02}(L/\xi) \quad (8.8)$$

Где  $L$  - размер системы (для квадратной решётки кол-во спинов =  $L * L$ )

$m_{02}$  обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} m_{02}(x) &= C, \quad x \gg 1 \\ m_{02}(x) &\sim x^{-2\beta/\nu}, \quad x \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Так как (8.8) содержит неизвестную нам корреляционную длину, преобразуем её с новой безразмерной функцией:

$$\tilde{m}_{02}(x) = x^{-2\beta} m_{02}(x^\nu) \quad (8.9)$$

Тогда получим:

$$m^2 = L^{-2\beta/\nu} \tilde{m}_{02}(L^{1/\nu}|t|) \quad (8.10)$$



## 8.1 Расчёты крит. экспонент при наблюдении коллапса данных

Для того, чтобы найти крит. экспоненты  $\beta$  и  $\nu$ , а также крит. температуру модели Изинга-блуждания, достаточно определить, при каких их значениях графики шкалирующих функций  $\tilde{m}_{02}$  для разных размеров  $L$  системы сливаются к как можно более однородному графику. Для этого значение шкал. функции рассчитывается из (8.10):

$$\tilde{m}_{02} = L^{2\beta/\nu} m_L^2(t) \quad (8.11)$$

Перед этим, был произведен расчёт зависимости квадрата намагниченности для квадратных решёток с длинами  $L=300-1000$  от температуры (<https://github.com/kamilla0503/saw/tree/master/Ising/BC> [7]). Наилучший коллапс данных наблюдался при:

$$T_C = 1.1976$$

$$\beta = 0.125$$

$$\nu = 1.01$$

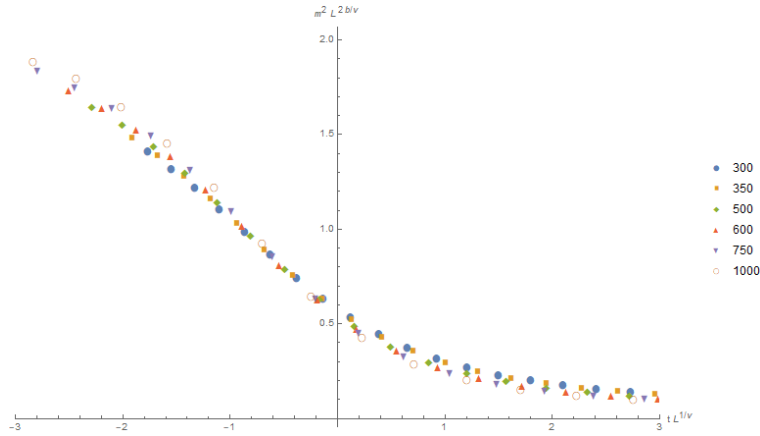


Рис. 1: График зависимости значений шкалирующей функции квадрата намагниченности от приведённой температуры при крит. экспонентах, обеспечивших наилучший коллапс данных

## 8.2 Определение погрешностей измерений экспонент

Разумеется, поскольку мы не можем численно определить качество коллапса данных, а лишь визуально определить при каких значениях он будет лучше, необходимо задать погрешность - область значений критических экспонент и температур, при которых качество коллапса данных наблюдаемой величины при измерении "на глаз" не меняется.

Таким образом, мы уточняем возможные критические значения для сравнения с расчётов в других источниках, для определения модели по её поведению.

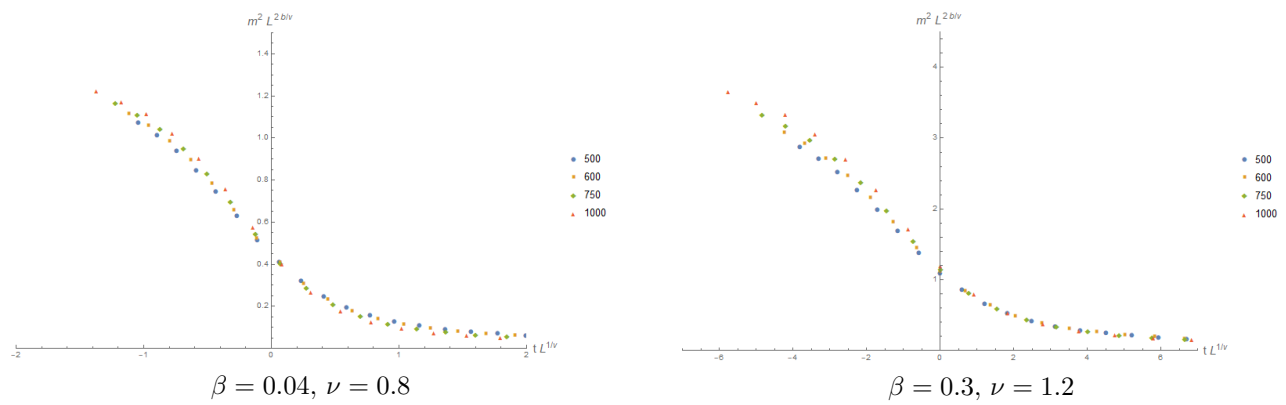


Рис. 2: Погрешность критических экспонент и их влияние на коллапс данных

Из графиков видно, что несмотря на колоссальное отличие от рассчитанных из литературы [3] значений, качество коллапса данных для квадрата намагниченности едва отличается между графиками - отличие заключается лишь в их масштабе - что говорит о серьёзной погрешности данного метода для расчёта критических показателей модели.

## 9 Модель Изинга на прямоугольной решётке

В данном разделе мы будем рассматривать зависимость наблюдаемых модели Изинга от формы решетки: в частности, от отношения сторон в прямоугольной решётке

### 9.1 Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга

Кумулянт Биндера для модели Изинга в критической точке рассчитывается по формуле:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \quad (9.1)$$

где  $\langle m^2 \rangle$  - средний квадрат удельной намагниченности,  $\langle m^4 \rangle$  - средняя удельная намагниченность в четвёртой степени.

Для сравнения значения кумулянтов модели прямоугольного Изинга с разными размерами, но одинаковым отношением сторон (так же Aspect Ratio или  $r$ ), так, что число спинов составляет  $L \times rL$  были проведены симуляции модели на основе алгоритма из проектной работы Сорокина Никиты [5] и Камиллы Файзулиной [6] - для этого были взяты длины  $L = 50, 100, 200$  и  $400$  и отношения сторон  $r = 1/4, 1/2, 3/4$  при  $2 \cdot 10^6$  итераций. Все расчёты проводились в критической точке [8]:

$$J = \frac{1}{2.26918...} \quad (9.2)$$

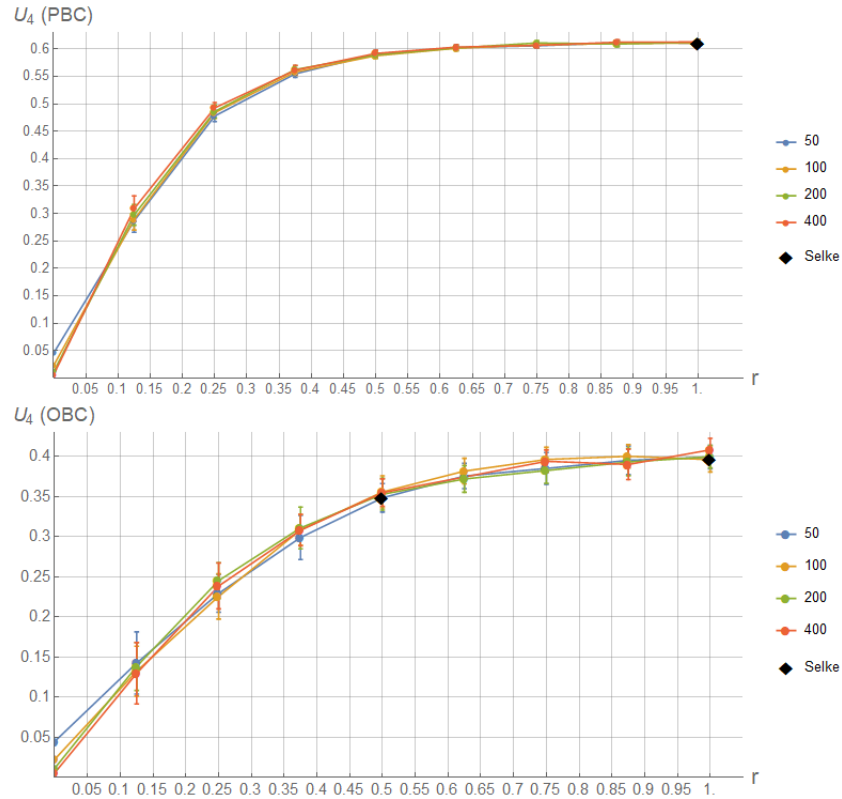


Рис. 3: График зависимости значения кумулянта Биндера (9.1) в крит. точке (9.2) от Aspect Ratio при открытых (снизу) и периодических гран. условиях (сверху). Черные точки - значения критических кумулянтов из работы W. Selke [8]

Крайние левые точки в отметке нуля являются расчётами для модели одномерного Изинга (где длина цепочки равна соответствующей стороне в двумерном изинге). Так, в случае открытых гран. условий (рис. 3

снизу) и периодических (рис. 3 сверху) значения кумулянта стремятся к нулю с увеличением длины цепочки (см. Проект6.pdf [2]). Черными точками отмечены значения критического кумулянта из работы Уолтера Сельке [8] -  $0.396 \pm 0.002$  для квадратной модели и  $0.349 \pm 0.002$  для прямоугольной с отношением сторон  $\tau = 1/2$  при открытых гран. условий. Для периодического случая квадратной модели критический кумулянт равен  $0.61069...$  [8].

Эти же значения отмечены в графиках 4 и 5 зависимости крит. кумулянта от обратной длины стороны как крайние левые (в нуле - так обозначен случай термодинамического предела).

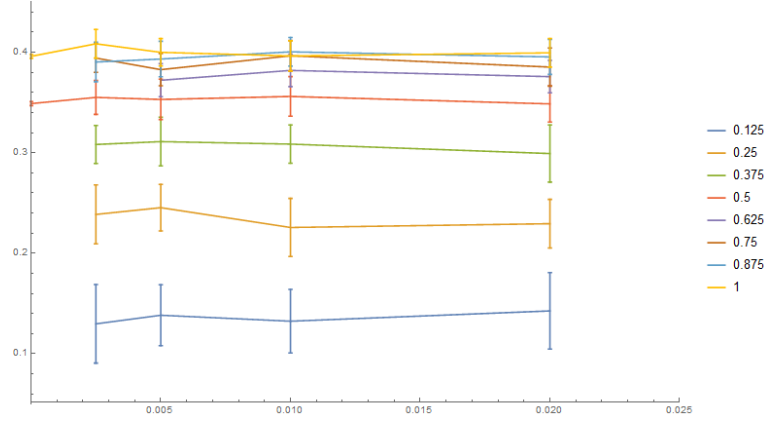


Рис. 4: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при открытых гран. условиях

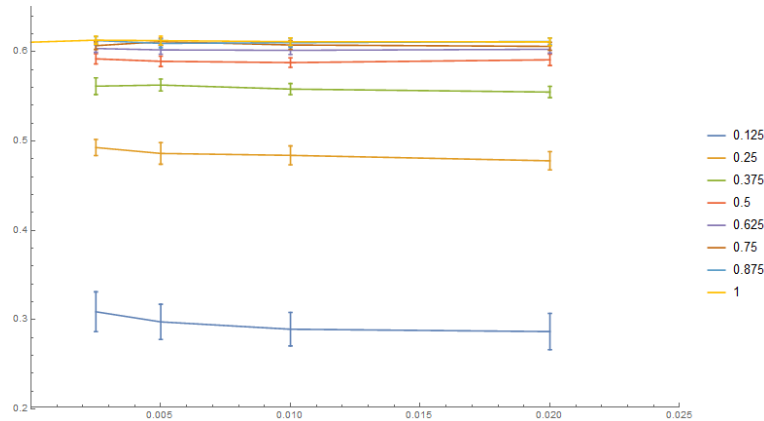


Рис. 5: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при периодических гран. условиях

Учитывая погрешность в расчётах симуляций, зависимость от обратной длины прямоугольника  $1/L$  не наблюдается.

## 9.2 Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий

Здесь мы рассмотрим основные понятия в модели взаимодействующих блужданий (Self-Avoiding Walks, SAWs), связанные с их формой и сравним их с прямоугольной моделью в тех же условиях.

Важнейшим параметром в описании полученной симуляциями Монте-Карло блуждания из  $N$  узлов является радиус инерции, численно равный среднему квадратическому расстоянию частиц ( $i$ -я частица в блуждании имеет вектор  $w_i$ ) от положения среднего арифметического центра система (сумма  $w_k$  в скобке) [9]:

$$R_g^2 = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left( w_i - \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_k \right)^2 = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^N (w_i - w_j)^2 \quad (9.3)$$

(Под операцией возведения вектора или разности векторов в квадрат подразумевается сумма квадратов элементов вектора) Так же для описания формы модели применяется тензор вращения относительно центра масс - матрица,  $\alpha\beta$ -й элемент которой рассчитывается по формуле (4) из статьи [10] :

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{c,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{c,\beta}) \quad (9.4)$$

где  $w_{c,\alpha}$  -  $\alpha$ -я координата вектора центра масс. В случае, если начало координат расположено в центре масс (следовательно, сумма векторов точек блуждания = 0), формула  $\alpha\beta$ -элемента тензора упрощается и численно равна второму моменту координаты (если  $\alpha = \beta$ ), или до среднего произведения разных координат по всем точкам блуждания.

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{(N+1)} \sum_{i=0}^N w_{i,\alpha} w_{i,\beta} \quad (9.5)$$

$$\sum_{i=0}^N w_i = 0 \quad (9.6)$$

Рассмотрим формулу (9.4). Так как  $w_c$  - центра масс блуждания, то:

$$w_c = \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_k \quad (9.7)$$

Так же можно представить  $i$ -й вектор блуждания как:

$$w_i = \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_i \quad (9.8)$$

Это позволит нам вытащить из скобок  $N+1$  и избавиться от неизвестного  $w_c$

$$\begin{aligned} Q_{N,\alpha\beta} &= \frac{1}{(N+1)^3} \sum_{i=0}^N \left( \sum_{k=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha}) \right) \left( \sum_{l=0}^N (w_{i,\beta} - w_{l,\beta}) \right) = \\ &= \frac{1}{(N+1)^3} \sum_{i=0}^N \sum_{k,l=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{l,\beta}) = \\ &= \frac{1}{(N+1)^3} \sum_{i=0}^N \sum_{k,l=0}^N (w_{i,\alpha} w_{i,\beta} - w_{i,\alpha} w_{l,\beta} - w_{k,\alpha} w_{i,\beta} + w_{k,\alpha} w_{l,\beta}) \end{aligned}$$

Раскроем суммирование у учётов зависимостей индексов:

$$\begin{aligned} Q_{N,\alpha\beta} &= \frac{1}{(N+1)^2} \left( \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} w_{i,\beta}) - \sum_{i,l=0}^N (w_{i,\alpha} w_{l,\beta}) - \sum_{i,k=0}^N (w_{k,\alpha} w_{i,\beta}) + \sum_{k,l=0}^N (w_{k,\alpha} w_{l,\beta}) \right) = \\ &= \frac{1}{(N+1)^2} \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} w_{i,\beta} - w_{k,\alpha} w_{i,\beta}) = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{k,\beta}) \end{aligned}$$

т.к. кол-во произведений координат разных векторов и одинаковых меньше в два раза. Полученная формула:

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{k,\beta}) \quad (9.9)$$

совпадает с формулой (4.1) из статьи о взаимодействующих блужданиях [9], что значит что используемое ими понятие "тензора вращения" совпадает.

### 9.3 Связь тензора инерции и тензора вращения

Можно заметить некоторое сходство в расчётах недиагональных элементов тензора инерции  $J$  и тензора вращения из статей [9, 10]. Действительно, для системы из  $N$  материальных точек единичной массы тензор инерции в системе центра масс рассчитывается следующим образом:

$$J = \begin{pmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{zz} \end{pmatrix} \quad (9.10)$$

$$J_{xy} = J_{yx} = - \sum_{i=1}^N x_i y_i \quad (9.11)$$

$$J_{yz} = J_{zy} = - \sum_{i=1}^N y_i z_i \quad (9.12)$$

$$J_{xz} = J_{zx} = - \sum_{i=1}^N x_i z_i \quad (9.13)$$

В тоже время, формулы диагональных элементов принципиально отличаются:

$$J_{xx} = \sum_{i=1}^N y_i^2 + z_i^2 \quad (9.14)$$

$$J_{yy} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + z_i^2 \quad (9.15)$$

$$J_{zz} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 \quad (9.16)$$

Сравнивая с формулой элементов тензора вращения в системе центра масс (9.5), можно заметить, что недиагональные элементы тензоров отличаются знаком и усреднением в тензоре вращения. Диагональные же элементы "противоположны" друг другу: в тензоре инерции они обозначают осевые моменты инерции (относительно  $O_\alpha$ , и поэтому обозначенные моменты одной координатой ( $J_{\alpha\alpha}$  используют сумму квадратов отличных от  $\alpha$  координат).

Таким образом, элементы тензора вращения в системе центра масс в трехмерном пространстве можно представить как:

$$Q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{i,\alpha}^2 = \frac{1}{N} \left( \sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - J_{\alpha\alpha} \right) = R_g^2 - \frac{1}{N} J_{\alpha\alpha} \quad (9.17)$$

где  $w_{i,\alpha}$  -  $\alpha$ -я координата радиус-вектора  $i$ -й материальной точки.

$$Q_{\alpha\beta} = -\frac{1}{N} J_{\alpha\beta}, \quad \alpha \neq \beta \quad (9.18)$$

Тогда матричный вид формулы тензора вращения (9.5) через тензор инерции (9.10) будет:

$$Q = R_g^2 * E - \frac{1}{N} J \quad (9.19)$$

где E - это единичная матрица порядка, совпадающим с размерностью данной модели Dim.

Мы знаем, что симметричная матрица (какой являются и Q, и J) всегда диагонализируема, а базис из собственных векторов - ортогонален. Пусть S - матрица перехода в жорданов базис тензора инерции. Произведём переход в этот базис для тензора вращения:

$$S^T Q S = S^T (R_g^2 * E - \frac{1}{N} J) S = R_g^2 * S^T E S - \frac{1}{N} * S^T J S$$

Матрица S - ортогональна, следовательно  $S^{-1} = S^T$ , поэтому:

$$S^T Q S = R_g^2 * E - \frac{1}{N} * J_D \quad (9.20)$$

где  $J_D$  - диагонализированная матрица тензора инерции. Очевидно, что полученная в правой части матрица - диагональная. Следовательно, матрица в левой части так же получилась диагональной после перехода в новый базис и жорданов базис тензоров инерции и вращения одинаковы, пусть и с разными собственными значениями. Соответствующие собственные значения матриц в жордановом базисе будут равны:

$$(S^T Q S)_{ii} = Q_{D,ii} = R_g^2 - \frac{1}{N} J_{ii}, \quad i = 1..Dim$$

Стоит подчеркнуть, что если жорданов базис составлен так, что собственные значения тензора инерции в матрице упорядочены по неубыванию, то в тензоре вращения собственные значения в матрице в этом базисе же будут упорядочены по невозрастанию.

## 9.4 Показатели формы блуждания из тензора вращения

Так как полученная матрица симметричная, то существует такой поворот, преобразующий её в диагональную (т.е., приводящий систему в Жорданов базис с собственными значениями по диагонали, и нулевыми недиагональными элементами), причём так, чтобы значения на диагонали были положительными и упорядоченными по невозрастанию.

В нашем двумерном случае,

$$Q_N = \begin{pmatrix} q_1 & 0 \\ 0 & q_2 \end{pmatrix}, \quad 0 < q_2 \leq q_1$$

Отметим так же, что сумма диагональных элементов тензора вращения равна квадрату радиуса вращения и инвариантна. Определим ещё один показатель формы из статьи Пелисsetто [9]:

$$\begin{aligned} s_1 &= \frac{\langle q_1 \rangle_N}{\langle R_g^2 \rangle_N} \\ s_2 &= 1 - s_1 = \frac{\langle q_2 \rangle_N}{\langle R_g^2 \rangle_N} \\ r_{12} &= \frac{s_1}{1 - s_1} \end{aligned}$$

Учитывая, что в  $s_1$  и  $s_2$  значения в числителе и знаменателе являются квадратами средних квадратичных значений, то следует вывод, что  $\sqrt{r_{12}}$  является знакомым нам отношением сторон из предыдущего подраздела, только в данном случае это отношение не сторон прямоугольника, а полуосей эллипса инерции, который образует полученная симуляциями модель-блуждание.

Так же из статьи Пелисsetто [9] определим среднюю асферичность (показатель, насколько блуждание отличается от круга):

$$A = \left\langle \frac{(q_1 - q_2)^2}{(q_1 + q_2)^2} \right\rangle_N \quad (9.21)$$

Асферичность необходима в следующем подразделе для оценки формы как блужданий в моделях взаимодействующих непересекающихся блужданий ISAW и Изинга на полимерной цепочке, так и прямоугольных решёток для модели Изинга: существует явная зависимость между отношением сторон  $r$  (точнее, отношением числа спинов по горизонтали ( $L$ ) и по вертикали ( $r \times L$ )) и значением асферичности соответствующей решётки:

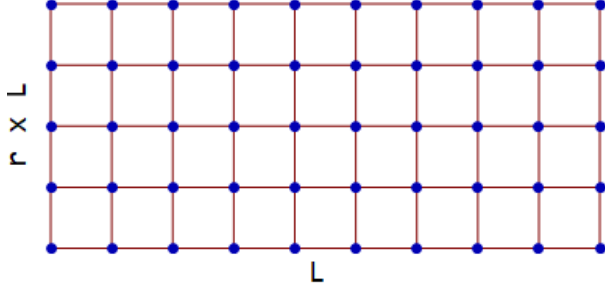


Рис. 6: Пример прямоугольной решётки со стороной  $L = 10$  и отношением сторон  $r = 0.5$

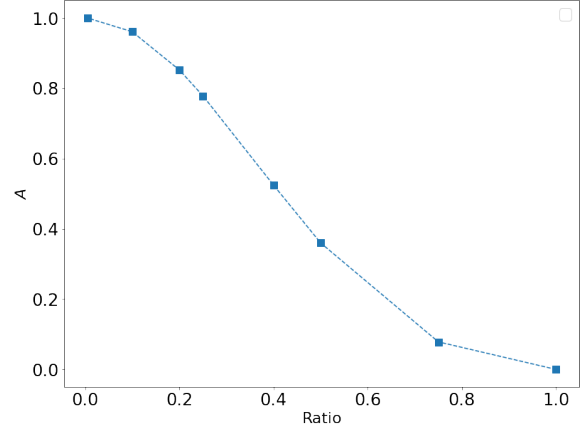


Рис. 7: График зависимости значения асферичности прямоугольной решётки от отношения сторон Ratio (или  $r$ )

## 9.5 Свойства моделей вблизи фазового перехода с учётом показателей формы

Цель данного раздела - сравнить кумулянты Биндера в области фазового перехода у трёх моделей - гомополимер (далее взаимодействующее блуждание или ISAW), модель Изинга на полимерной цепочке (далее PolIsing) и модель Изинга на прямоугольной решётке (далее "прямоугольный Изинг"). В отличие от первых двух моделей, отношение сторон прямоугольного Изинга является параметром модели, а не наблюдаемой величиной. Следовательно, цель - сравнить крит. кумулянты моделей с прямоугольным Изингом, имеющим те же показатели формы, что имеют ISAW и PolIsing в области фазового перехода.

Для этого для первых двух моделей была рассчитана зависимость значения асферичности  $A$  (9.21) от константы взаимодействия  $J$  при длинах  $N = 1000, 2500, 3600, 4900$ .

Вертикальными линиями обозначены точки фазового перехода моделей: красными линиями отмечены граничные с точки зрения погрешности точки перехода в модели Изинга на гомополимерной цепочке ( $0.833 \pm 0.003$ , или  $T_c = 1/J_c = 1.199 \pm 0.003$  [11]), а черной сплошной - у модели ISAW ( $\approx 0.667$  [9]). Горизонтальной линией отмечено значение асферичности в критической области модели ISAW из статьи Пелиссетто, равное  $0.3726(7)$  ((4.10) [9]). Однако перед тем как найти значение кумулянта для модели прямоугольного Изинга, необходимо подобрать такое отношение сторон, чтобы асферичность полученного прямоугольника совпадала со значением асферичности в точках перехода соответствующих моделей.



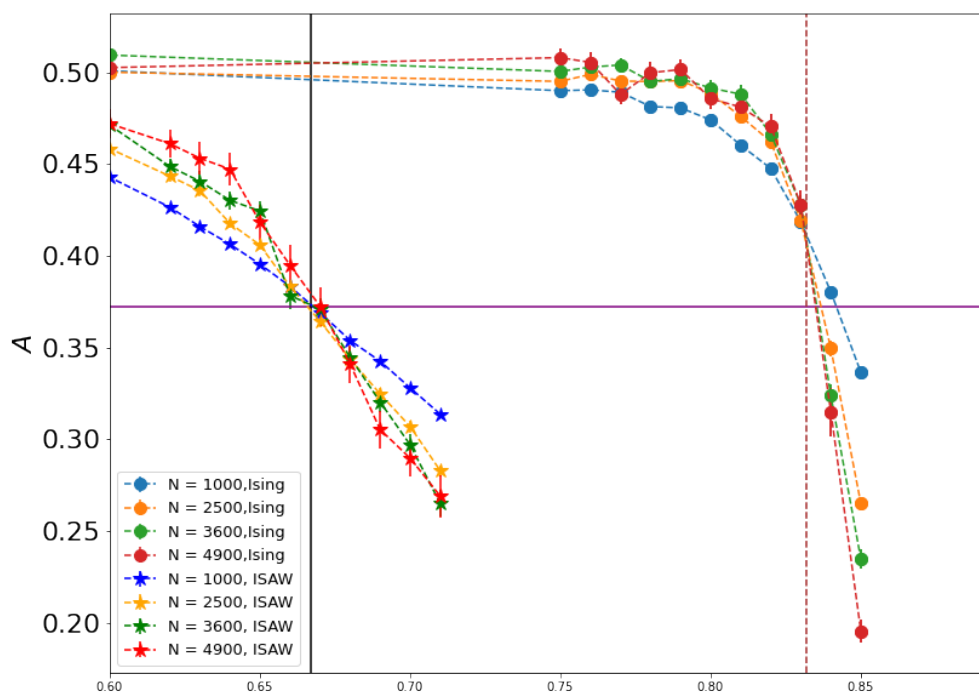


Рис. 8: График зависимости значения асферичности от константы взаимодействия для моделей взаимодействующего блуждания (слева) и Изинга на полимерной цепочке (справа)

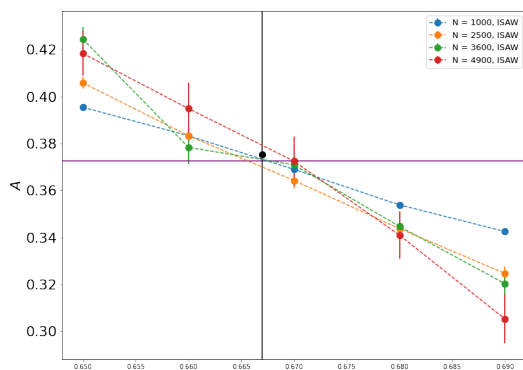


Рис. 9: График 8, увеличенный в масштабе в области фазового перехода модели взаимодействующих блужданий

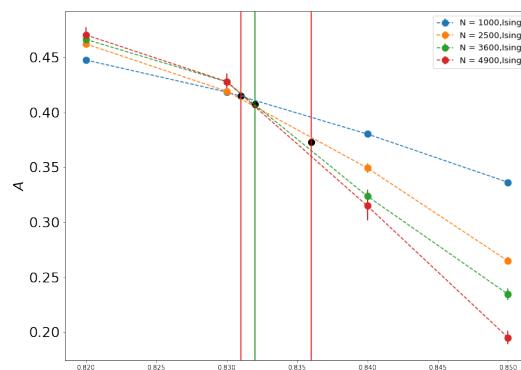


Рис. 10: График 8, увеличенный в масштабе в области фазового перехода Изинга на полимерной цепочке.

Чёрные точки на графиках 9-10 будут точками, для которых мы будем подбирать отношение сторон для модели прямоугольного Изинга по значению асферичности. Для модели PolIsing точки в красных линиях показывают среднее значение асферичности в граничных точках перехода - по ним мы определим погрешность

измерений кумулянта:  $r = 0.465$  и  $0.49$ ,  $U_4 = 0.340 \pm 0.006$  и  $0.348 \pm 0.006$ . В точке на зелёной линии - в точке ближайшей к пересечению (переходу) рассчитаем само значение кумулянта:  $r = 0.47$ ,  $U_4 = 0.343 \pm 0.006$ . Тогда значение критического кумулянта модели Изинга в прямоугольной решётке для PolIsing  $U_4 = 0.343 \pm 0.009$

Для ISAW критический кумулянт прямоугольного Изинга рассчитан для  $r = 0.49$  и равен  $0.349 \pm 0.006$  соответственно.

## 10 Оценка работы алгоритма для трёхмерной модели Изинга

### 10.1 Расчёт магнитных свойств

Для первого набора симуляций трёхмерной модели Изинга была рассмотрена область  $J = 0.5 - 0.63$  и длины 100-300.

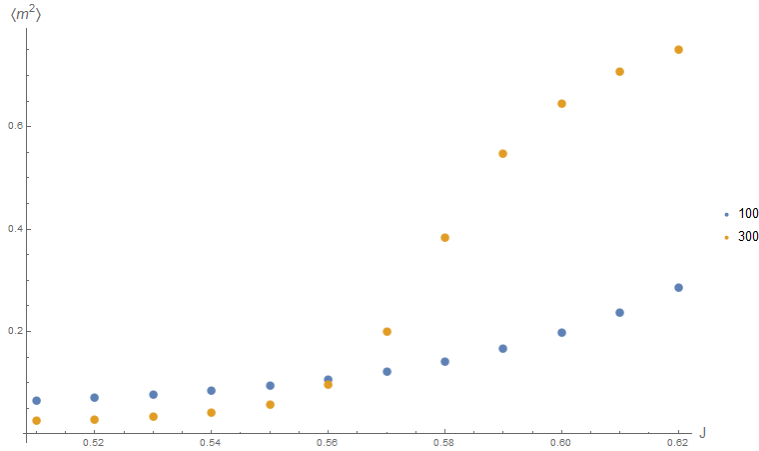


Рис. 11: График зависимости квадрата намагниченности от  $J$

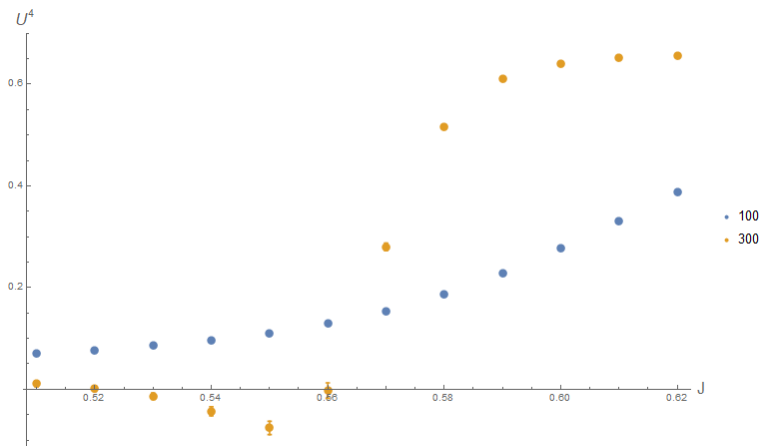


Рис. 12: График зависимости значения кумулянта Биндера от  $J$

Полученные графики подтверждают первичные расчёты Камиллы, в том числе и неясную область отрицательных значений кумулянта Биндера.

### 10.2 Расчёт долей узлов с 2-6 соседями

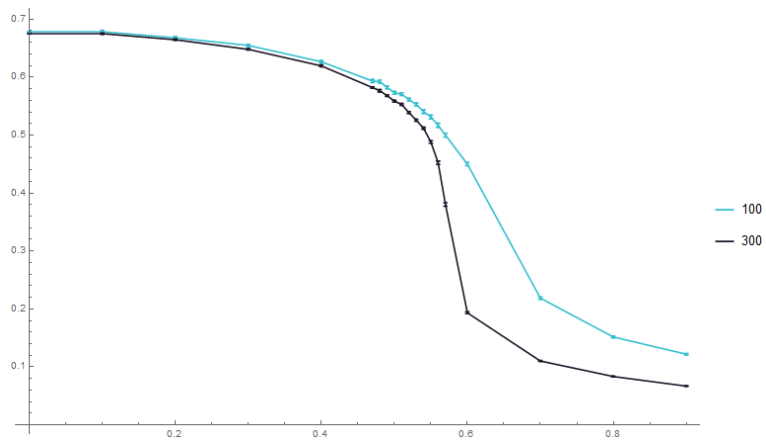


Рис. 13: График зависимости доли узлов с 2 соседями

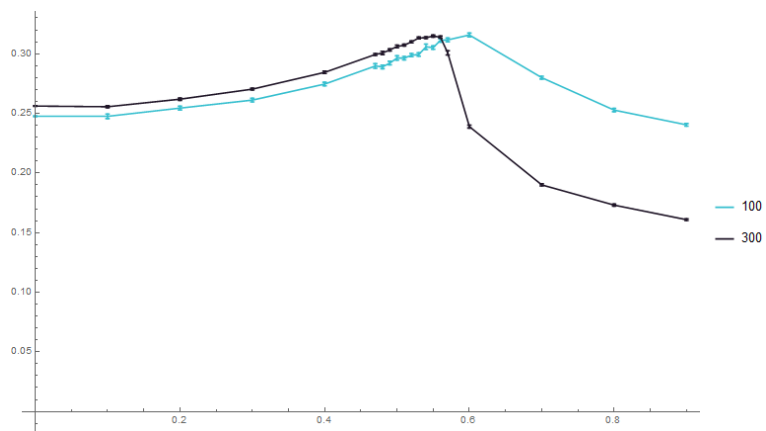


Рис. 14: График зависимости доли узлов с 3 соседями

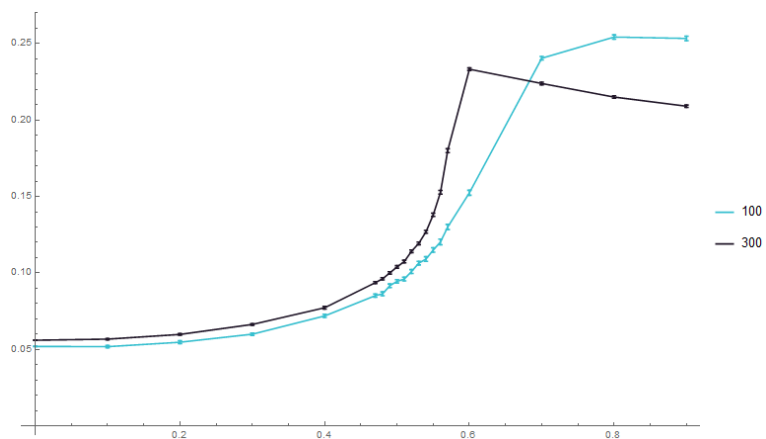


Рис. 15: График зависимости доли узлов с 4 соседями

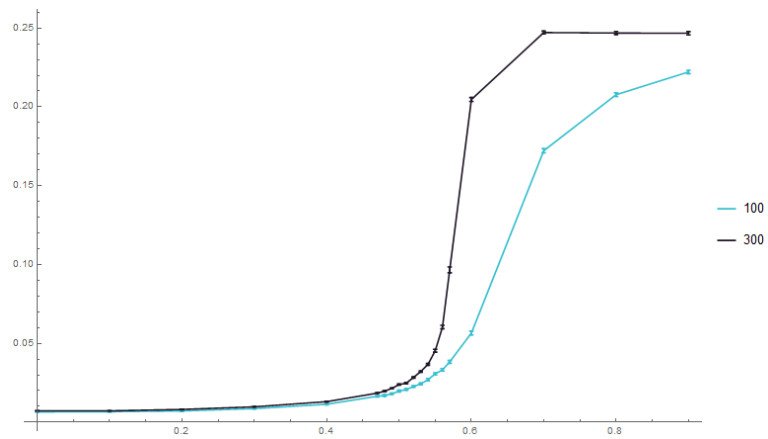


Рис. 16: График зависимости доли узлов с 5 соседями

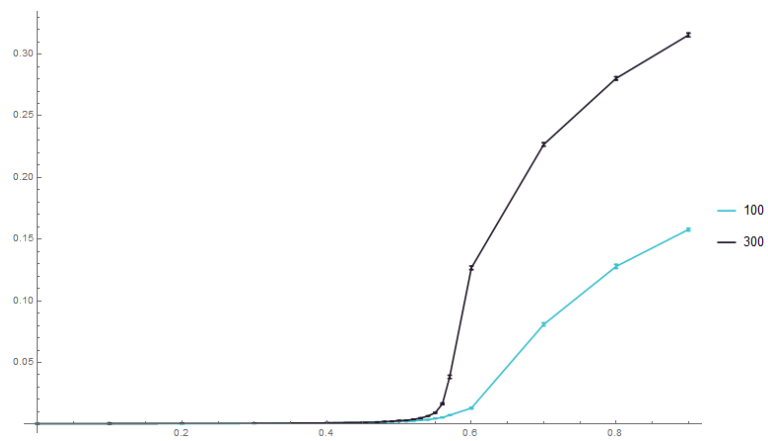


Рис. 17: График зависимости доли узлов с 6 соседями

## Список литературы

- [1] Swendsen R. An introduction to statistical mechanics and thermodynamics
- [2] Github Repository: Chpel/ProjectMagnet (<https://github.com/Chpel/ProjectMagnet>)
- [3] M. E. J. Newman, G. T. Barkema Monte Carlo Methods in Statistical Physics
- [4] Wolfhard Janke Monte Carlo Methods in Classical Statistical Physics (from Lecture Notes in Physics - Springer)
- [5] Github Repository: ShroedingerCat/Self-learning-Monte-carlo-algorithms (<https://github.com/ShroedingerCat/Self-learning-Monte-carlo-algorithms>)
- [6] Github Repository: kamilla0503/SAWs (<https://github.com/kamilla0503/SAWs>)
- [7] Github Repository: kamilla0503/saw (<https://github.com/kamilla0503/saw>)
- [8] W. Selke Critical Binder cumulant of two-dimensional Ising models
- [9] S. Caracciolo, M. Gherardi, M. Papinutto, A. Pelissetto, Geometrical Properties of Two-Dimensional Interacting Self-Avoiding Walks at the  $\theta$ -Point
- [10] Handan Arkin, Wolfhard Janke Gyration tensor based analysis of the shapes of polymer chains in an attractive spherical cage
- [11] Damien Paul Foster, Debjyoti Majumdar Critical Behaviour of Magnetic Polymers in Two and Three Dimensions