

Аннотация

Данная работа посвящена исследованию магнитного полимера в виде модели случайного блуждания без самопересечений со спиновой подсистемой. Модель исследуется на нескольких решётках: кубические решётки размерности $d = 2, 3, 4$, а так же треугольная двумерная решётка. Исследуется задача динамического беспорядка в каноническом ансамбле: спиновая подсистема и конформация модели имеют соразмерные времена релаксации, а длина цепочки фиксированная. Доли узлов с фиксированным числом соседей (далее, доли ЛКЧ, локального координационного числа) определяются как мера локальной плотности блуждания. С помощью методов Монте-Карло на основе алгоритма Червя, данные величины рассматриваются между моделями на решетках с равными размерностями или координационными числами. Дополнительно исследуется шкалирование долей ЛКЧ в случае отсутствия в блуждании внутреннего взаимодействия, а так же без условия исключенного объёма. Так же исследуются критические свойства моделей взаимодействующих и магнитных полимеров на треугольной решётке. Результаты показали различие точек фазового перехода между моделями на треугольной и ранее известной квадратной решётках, однако их критические экспоненты оказались равны.

Abstract

The study focuses on a model on a magnetic polymer as a chain under excluded volume effects with closely interacting Ising spins. The model is studied on lattices with different numbers of dimensions d : cubic lattice with $d=2, 3, 4$ and triangular one with $d=2$. The study focuses on a problem of dynamic disorder in a canonical ensemble, as the model has comparable relaxation times between spin subsystem and conformation, and the fixed length of a chain. The mean fraction of monomers on a chain with fixed number of neighbors (or bulks) is considered as a geometric measure of the local compaction of conformation. Using Monte-Carlo methods in Worm-Algorithm, these measures are compared between chains with respective spin-to-spin coupling constant J in lattices having equal coordination number or dimensionality. The fractions of the LCN (local coordination number) are also researched by finite-size scaling methods in cases of zero-interaction and disabled excluded volume effects. The critical properties of the model were also researched on a triangular lattice. Our results suggests that the "triangular" theta-point differs from the results for the square lattice, but models on both lattices are appeared to have equal critical exponents.

Содержание

1	Введение	1
2	Модели и методы	3
3	Геометрические свойства модели Ising-ISAW с точки зрения числа соседей в узлах	6
3.1	Введение	6
3.2	Особенности ранних результатов на квадратной решётке	6
3.3	Сравнение модели Изинга и полимерной цепочки в решетках с 2-6 возможными соседями мономеров .	7
3.4	Алгоритм исследования характера зависимости значения долей узлов от длины при $J=0$	10
3.5	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на треугольной решётке с квадратной в $J=0$	12
3.6	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на решётках с большим числом соседей в $J=0$. . .	14
3.7	Число соседей и атмосферы блужданий	15
4	Геометрические свойства простого случайного блуждания	18
4.1	Алгоритм генерации блужданий	18
4.2	Результаты симуляций	19
4.3	Погрешности результатов	20
4.4	Шкалирование результатов	21
4.5	Зависимость доли уникальных узлов от количества шагов	26
4.6	Итоговое сравнение функций долей узлов n_i	29
5	Исследование поведения концов блужданий модели RW	31
5.1	Зависимость атмосфер от количества шагов блуждания и уникальных узлов	33
5.2	Сравнение результатов вероятностей атмосфер от N и N_{unique}	37
6	Сравнение поведения атмосфер блужданий $p_N^{(k)}$ и долей узлов n_i модели RW	39
6.1	Сравнение функций от N_{unique}	39
6.2	Сравнение функций от N	40
6.3	Итоги сравнения	41
6.4	Планируемая деятельность	41
7	Критическое поведение модели IsingISAW на треугольной решётке	42
7.1	Поиск точки фазового перехода	42
7.2	Критические экспоненты модели	45
8	Критическое поведение взаимодействующего блуждания без самопересечений на треугольной решётке	46
9	Заключение	48

10 Программно-техническое приложение	49
10.1 Применение jit-компиляции при программировании на языке Python	49
10.2 Итерации программного комплекса Rand-Walk	50

1 Введение

Линейный полимер - одна из классических моделей полимерной физики, с помощью которой исследуется взаимодействие молекулы вещества с разбавленным растворителем, или с другими молекулами, в случае концентрированного раствора [1]. Линейный полимер представляется цепочкой мономеров, взаимодействующих как с раствором, так и друг с другом. Каждый мономер содержит область исключенного объёма, отталкивающую другие, не связанные с ним полимером мономеры, тем самым не допуская нарушения линейной целостности цепочки. Одной из математических интерпретаций полимера с исключенным объёмом вокруг его составляющих выступает случайное блуждание без самопересечений (self-avoiding walk, далее SAW) на некоторой решётке. Конформацию полимера изображают как последовательность неповторяющихся узлов решётки, чем обеспечивается отсутствие самопересечений. Последовательные пары блуждания соединены ребром решётки, что ограничивает слишком близкое размещение мономеров, запрещённое исключенным объёмом, а также задаёт участки вокруг узла блуждания, где могут лежать другие мономеры [1, 2].

Между близко расположенными в пространстве мономерами действуют притягивающие силы Ван-дер-Ваальса. В то же время, полимер взаимодействует с молекулами растворителя: "хорошим" для мономера считается растворитель, взаимодействие с которым считается энергетически выгодным, нежели с ближайшими мономерами. В таком случае полимер переходит в развернутое состояние, с малым числом близких связей между мономерами. При взаимодействии с иным растворителем, ситуация обратна и полимер сворачивается в более плотную глобулу, увеличивая внутреннее взаимодействие. Простейшей моделью, симулирующая побродное поведение полимера, является взаимодействующее блуждание без самопересечений на решётке (далее - ISAW), чья энергия равна числу взаимодействий в системе. Свойства системы в термодинамическом равновесии меняются в зависимости от параметра, замещающего все взаимодействия системы константой взаимодействия между узлами. Температура среды, обратно пропорциональная энергии цепочки, отображает свойства растворителя.

Таким образом, между двумя основными конформационными состояниями полимера, описанными выше, расположена точка фазового перехода математической модели ISAW, разделяющая состояния преимущества Ван-дер-Вальсовых сил, эффектов исключенного объёма или взаимодействия мономеров с растворителем. В работе [1] была доказана трикритичность данной системы.

Существуют также полимеры с более сложным внутренним взаимодействием. Так, магнитные полимеры обладают мономерами с магнитным моментом, взаимодействие между которыми направлено как на притяжение, так и на отталкивание близлежащих мономеров. Система приобретает новые свойства, и теперь, в зависимости от вышеперечисленных ранее факторов, может проявлять парамагнетические свойства или наоборот, приобрести спонтанную намагниченность мономеров и, следовательно, ферромагнетические свойства. Аналогичные свойства добиваются в модели ISAW путём внедрения спиновой подсистемы в конформацию с сохранением условия связи между ближайшими узлами. Таким образом была получена модель Изинга на случайном блуждании без самопересечений (далее - IsingISAW) [3]. Спиновая подсистема модели взята от регулярной модели Изинга на решётке, которая, под действием параметра константы взаимодействия, проявляет парамагнетические или ферромагнетические свойства.

Основным способом исследования подобных моделей являются симуляции их подсистем алгоритмами Монте-Карло [4–6]. Задачи отличаются временами релаксации конформационной и спиновой подсистемы. Так, в задачах

замороженного спинового или конформационного беспорядка одна из подсистем имеет значительно большее время релаксации, чем другая. Задача размороженного беспорядка, в свою очередь, задаётся условием равного времени релаксации обеих подсистем, и является менее изученной.

Часть исследований модели проводятся с использованием теории среднего поля - так были рассмотрены магнитные свойства модели IsingISAW с дополнительным внешним полем [7]. Однако, существуют некоторые наблюдаемые величины, требующие более статистического подхода. В отдельно взятой конформации полимера выделяются несколько внутренних структурных групп: образованные в термодинамическом пределе кластеры мономеров, или блобы, содержат ядро кластера с минимальным взаимодействием с раствором, и граничный слой с частичным взаимодействием мономеров с раствором. Сами кластеры соединены мостами - одномерными цепочками из мономеров [1]. Их отношение с ростом длины цепочки позволяет более тщательно исследовать структурные изменения полимера (такие как отношения поверхность-объём) в приближении к реальным моделям в виде цепочек бесконечно большой длины методом шкалирования конечной длины.

В контексте моделей блужданий на решётке, принадлежность мономера к той или иной структурной группе характеризуется его локальным координационным числом - числом связей, образованных с данным мономером, или числом "соседей" данного узла.

В прошлой работе [8] было проведено исследование критического поведения модели IsingISAW на квадратной решётке: был определён непрерывный характер фазового перехода, а так же оценены критические показатели модели. Подобное исследование проводилось и для трёхмерной модели в работе [9]. Также для квадратной решётки была рассмотрена новая геометрическая характеристика блуждания - доля узлов с фиксированным числом соседей - и зафиксировано нетривиальное поведение отношения поверхность-объём с ростом константы взаимодействия J . Одно из основных направлений данной выпускной квалификационной работы посвящено исследованию данной характеристики среди структурных модификаций модели IsingISAW на квадратных решётках при размерности $d=2,3,4$, а так же на треугольной 2D-решётке. Так же будет исследовано влияние на поведение локального координационного числа эффектов взаимодействующих между мономерами сил, на примере невзаимодействующего СБС, и исключенного объёма, при рассмотрении простого случайного блуждания.

Ранее треугольная решётка была исследована в качестве модификации как взаимодействующего полимера ISAW [10], так и регулярной модели Изинга [11, 12]. В данной работе также исследуется критическое поведение модели IsingISAW на треугольной решётке, а также уточняются результаты прошлых исследований взаимодействующего полимера ISAW.

Дальнейшая работа устроена следующим образом: в секции 2 в деталях описаны исследуемые модели, их модификации, наблюдаемые в рамках экспериментов величины, а также методы симуляций блужданий, секция 3 посвящена исследованию локального координационного числа мономеров модели Ising-ISAW в контексте долей узлов с фиксированным числом соседей на различных решётках, аналогичное исследование для простого случайного блуждания описано в секциях 4-6, и, наконец, в секциях 7-8 исследуются критические свойства моделей взаимодействующих и магнитных полимеров на треугольной решётке.

2 Модели и методы

В рамках данной работы определяется несколько моделей: в первую очередь определяется модель взаимодействующего блуждания без самопересечений ISAW. Энергия системы ISAW с конформацией u (последовательности узлов решётки, на которых размещена цепочка) фиксированной длины N равна числу связей между ближайшими мономерами в цепочке (2.1):

$$\begin{aligned} E(u) &= J \sum_{\langle i,j \rangle} 1 \quad i,j \in u, |u| = N \\ Z &= \sum_u \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Модель рассматривается в каноническом ансамбле, поэтому статистическая сумма модели суммирует все возможные конформации u длины N .

Так же определим модель Изинга на случайном блуждании без самопересечений (далее - Ising-ISAW). В мономерах конформации длины N встроена спиновая подсистема $\{s\}$, принимающая значение в узлах цепочки $+1$ или -1 , вследствие чего энергия рассчитывается между ближайшими узлами цепочки как:

$$E(s,u) = J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad i,j \in u, |u| = N \quad (2.2)$$

Статическая сумма модели берётся по всем возможным последовательностям $\{s\}$ и конформациям u фиксированной длины:

$$Z = \sum_s \sum_u \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \quad (2.3)$$

в обоих представленных моделях T — температура, k — постоянная Больцмана. Без потери общности можно считать $kT = 1$, тем самым оставляя J единственным самостоятельным параметром модели.

Множество $\langle i, j \rangle$ под знаком суммирования обозначает пары узлов решётки, принадлежащие конформации модели u , между которыми лежит ребро исследуемой решётки. В зависимости от выбранной решётки, для узла конформации меняется множество узлов решётки, которые могут считаться "ближайшими" к нему, ровно как и максимальное количество связей у одного мономера - так называемое "координационное число" решётки. Так, квадратной решётке (левый рисунок 1) соседями узла можно считать мономеры, расположенные сверху, снизу, слева и справа и него, в то время как в треугольной решётке соседними так же считаются и узлы на одной из диагоналей, проходящей через узел решётки, а на кубической – к соседним приравнены узлы с теми же координатами на соседних плоскостях решётки. Узел 4D-гиперкубической решётки имеет 8 соседей, каждый из которых отличается в одной координате на ± 1 от рассматриваемого узла.

Первая часть выпускной квалификационной работы посвящена исследованию *локального координационного числа* мономеров блуждания в виде долей узлов блуждания с фиксированным числом соседей (4.6). Минимальное исследуемое число соседей в моделях блужданий без самопересечений - два, что соответствует внутреннему узлу одномерной цепочки с соседями в виде предыдущего и следующего в последовательности. Максимальное исследуемое число соседей соответствует координационному числу рассматриваемой решётки C_L . Для каждого узла u_i блуждания рассчитывается число его соседей c_i (2.4) и ведётся статистика узлов блуждания с таким же числом соседей.

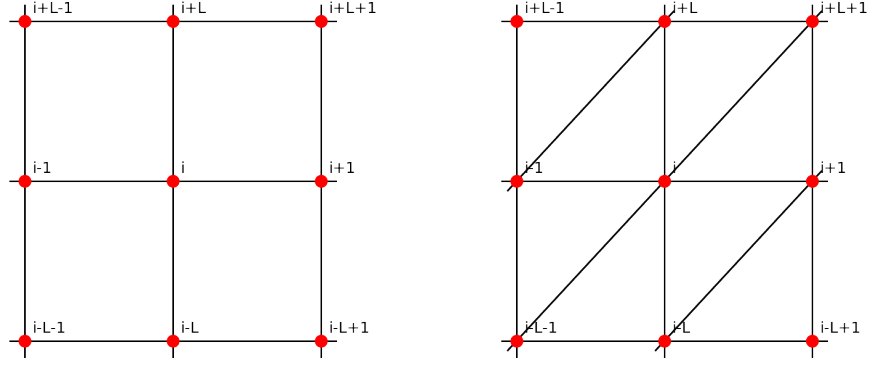


Рис. 1: Связи узлов в квадратной (слева) и треугольной решётках (справа). Узлы пронумерованы последовательно (слева на направо и снизу вверх), в одном ряду решётки L узлов.

$$c_i = \sum_{\langle u_i(\text{fixed}), j \rangle} 1 \quad (2.4)$$

$$n_k = \sum_{i=1}^{N-2} [c_i == k] / N \quad (2.5)$$

Частный случай локального координационного числа является атмосфера СБС - число незанятых мономерами блуждания узлов решётки вокруг конца блуждания [17].

$$a = C_L - c_{n-1}, \quad (2.6)$$

где C_L - координационное число исследуемой решётки, а c_{n-1} - число соседей конца блуждания

Определим два основных критических вида перехода, происходящих в моделях - конформационный и магнитный. Конформационный переход разделяет состояние рыхлой цепочки (при высоких температурах / низкой силе взаимодействия) и плотной глобулы (при низких температурах / сильном взаимодействии ближайших узлов). Для исследования конформационного перехода исследуется расстояние между концами блуждания R_N^2 :

$$R_N^2 = (u_{N-1} - u_0)^2 \quad (2.7)$$

Состояния отличаются шкалированием радиуса между концами блужданий $\langle R_N^2 \rangle$ относительно длины цепочки N : при больших длинах цепочки ($N \gg 1$) радиус (2.7) шкалируется по степенному закону с поправками на конечный размер цепочки.

$$\langle R_N^2 \rangle = N^{2\nu} (C + \dots) \quad (2.8)$$

В качестве основной магнитной характеристики модели рассматривается набор средних намагниченностей нескольких порядков:

$$m^k = \left(\sum_{i \in u} \sigma_i / N \right)^k \quad (2.9)$$

Для поиска точки магнитного перехода рассматривается зависимость кумулянта Биндера U_4 (2.10) от константы J .

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3(\langle m^2 \rangle)^2} \quad (2.10)$$

Для регулярной модели Изинга было доказано [13], что с ростом размеров решётки значение кумулянта сходится к 0 при парамагнетическом состоянии, и к $2/3$, что соответствует ферромагнетическим свойствам модели. В работе [13] так же было обнаружено нетривиальное значение кумулянта, почти независимое от размеров решётки. Значение константы J , при котором достигалась нетривиальная сходимость, являлось точкой магнитного перехода модели. Таким образом, предполагается, что точкой магнитного перехода модели является точка пересечения графиков кумулянта U_4 при разных длинах цепочки.

Ниже представлены точки фазового перехода модели взаимодействующих блужданий и модели Изинга на СБС, ранее полученные в других работах (таблица 1), а так же полученные в рамках данной работы (таблица 2).

lattice	Ising-ISAW	ISAW
square	0.8340(5) [8]	0.6673(5) [14]
triangular	—	0.41(7) [10]
cubic	0.5263 ± 0.055 [9]	0.2779 ± 0.0041 [20]

Таблица 1: Значения J критических точек фазового перехода модели Изинга на случайном блуждании (Ising-ISAW) и взаимодействующего полимера (ISAW) на квадратной, треугольной и кубической решётках соответственно

lattice	Ising-ISAW	ISAW
triangular	0.545(5)	0.42(1)

Таблица 2: Дополнение к таблице 1: результаты, полученные в рамках данной работы

Для симуляции моделей в несколькими степенями свобод применяются методы Монте-Карло. Исследуемая модель Ising-ISAW уже рассматривалась ранее в работах [7, 18] задаче замороженного беспорядка - когда свойства модели исследовались генерацией спиновой подсистемы на уже сгенерированных конформациях. В нашей работе исследуется задача динамического беспорядка, в которой генерируются одновременно и блуждания фиксированной длины N , и спиновые состояния на ней. Для генерации движущихся конформаций фиксированной длины используется алгоритм на основе метода Червя [5], в то время как генерация состояний спиновой подсистемы проводится с помощью кластерного алгоритма Вольфа [6]. Полное описание используемого метода моделирования описаны в работе [8].

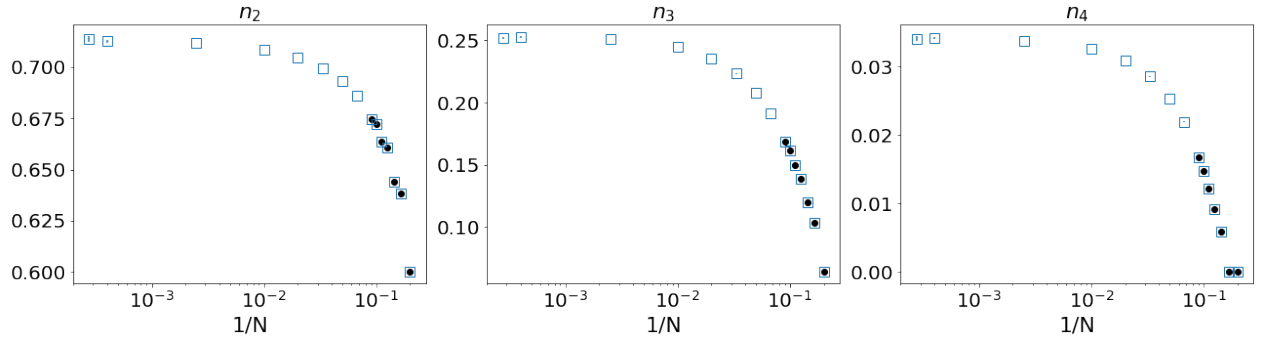


Рис. 3: Зависимостей средних долей узлов конформации с фиксированным числом соседей (от 2 до 4) модели ISAW при $J=0$ от обратной длины $1/N$ при длинах конформации $N=5-3600$. Пустые квадраты - результаты симуляций Монте-Карло, черные точки - расчёты полученные путём полного перебора возможных конформаций [23]

3 Геометрические свойства модели Ising-ISAW с точки зрения числа соседей в узлах

3.1 Введение

В данном разделе мы изучаем такое геометрическое свойство модели, как доли узлов с фиксированным числом соседей. У каждого узла можно определить число соседей или количество близких связей на смежных ячейках исследуемой решётки (см. левый рисунок 1). Рассмотрим пример конформации на квадратной решётке на рисунке 2. Чёрные точки соответствуют узлам с 2-мя соседями, а последовательность таких узлов подряд в конформации можно интерпретировать как "одномерный" участок. Узлы с тремя соседями расположены, как правило, на границах кластеров, и отображены на примере синими треугольниками, в то время как узлы с четырьмя соседями (красные квадраты) типичны для узлов в глубине кластера.

Сначала, чтобы определить правильность алгоритма расчёта долей искомым узлов, были проведены симуляции Монте-Карло модели ISAW при $J=0$ на длинах N от 5 до 3600, а так же произведены расчёты вручную для цепочек малых длин - от 5 до 11. Результаты изображены на рисунке 3 - разные типы расчётов полностью совпали, что говорит о правильности используемого алгоритма.

3.2 Особенности ранних результатов на квадратной решётке

Мы провели симуляции Монте-Карло для долей узлов с фиксированным числом соседей для моделей Ising-ISAW и ISAW с зависимостью от значения константы взаимодействия J для длин $N=1000, 2500, 3600, 4900$. Результаты изображены на рисунке 4, а также опубликованы в работе [8].

На графиках 4 примечательны значения в точке $J=0$ у графиков узлов с 2-мя (левый) и 3-мя (средний) соседями: было первоначальное предположение, что в пределе бесконечной длины конформации они будут равны $3/4$ и $1/4$ соответственно. Так

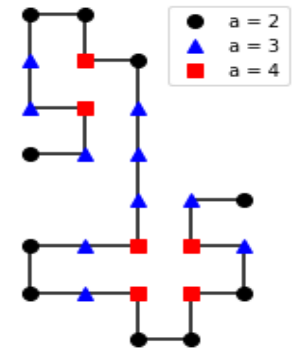


Рис. 2: Пример конформации на квадратной решётке с подсчётом соседей

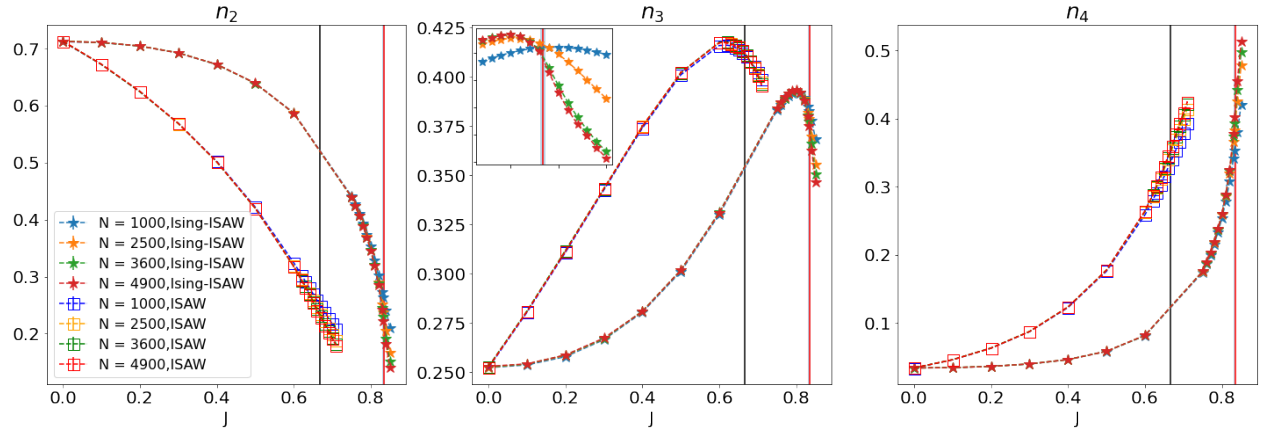


Рис. 4: Зависимость доли узлов конформации с двумя (слева), тремя (по центру) и четырьмя соседями (справа) у моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW на квадратной решётке от J . Черной линией обозначена точка фазового перехода модели ISAW, красной - Ising-ISAW, на квадратной решётке (см. таблицу 1). График взят из работы [8]

же интересен вопрос универсальности данного свойства на других решётках: будут ли эти значения долей n_2 и n_3 при тех же условиях равны или хотя бы похожи в других решётках.

3.3 Сравнение модели Изинга и полимерной цепочки в решетках с 2-6 возможными соседями мономеров

Рассмотрим средние доли узлов с фиксированным числом соседей в решётках, которые имеют от 2-х до 6-ти возможных соседей: в кубической, у которой 5-й и 6-й соседи мономера расположены в соседних плоскостях, и треугольной, где 5-й и 6-й сосед мономера лежат на диагонали, проходящей через данный узел (в данной решётке лишь одна плоскость, см. правый рисунок 1).

График зависимости долей от константы взаимодействия J (используется в гамильтониане конформации по формуле 2.2, однако в отличие от одномерного случая, где считаются связи между соседними по индексу узлами конформации, здесь считаются связи между узлами, лежащими на соседних ячейках исследуемой решётки) изображен на рисунке 5 - слева показаны результаты симуляций Монте-Карло на кубической решётке, справа - на треугольной решётке. Цвета графиков соответствуют длинам цепочек - $N=100$ зелёные, 300 синие, 600 красные и 1200 фиолетовые. Число шагов симуляций - от 10^{10} вдали от пиков до 10^{12} в районе пиков графиков. Вертикальными линиями отмечены точки критического перехода из таблиц 1 и 2.

Результаты симуляций модели ISAW отмечены пустыми квадратами, а модели Ising-ISAW - звёздами. Примечательно, что графики зависимости долей от J данной модели значительно плавнее, чем у модели Изинга на случайном блуждании, а так же процессы уплотнения конформаций (когда доли n_2 и n_3 уменьшаются, а доли узлов с большим числом соседей увеличивается) начинаются раньше, пропорционально значению точки перехода J_c . Последнее, скорее всего, связано с тем, что точка перехода модели ISAW меньше, чем у Ising-ISAW (для кубической это известно, для треугольной просто предположение). Возможно, что при масштабировании левой части графиков кубической решетки относительно J_c (то есть, от $0 * J_c$ до $1 * J_c$), мы бы получили примерно одинаковые графики.

В то же время, предельные значения у данных моделей совпадают - графики одинаковых длин и решёток разных моделей исходят из одной точки при $J=0$ (что логично, ведь при $J=0$ поведение Ising-ISAW соответствует ISAW) и приходят в одну точку при $J=1$.

Данные модели Ising-ISAW в свою очередь отмечены на графике 5 звездочками. Стоит отметить, что при прохождении точки перехода в кубической решётке, графики долей узлов с любым числом соседей словно претерпевают скачок, усиливающийся с ростом длины цепочки, в отличие от треугольной решётки, где процесс непрерывен.

Говоря о свойствах Ising-ISAW кубической решётки, необходимо подчеркнуть, что в на графике $\langle n_3 \rangle$ мы видим похожее поведение в $J=0$ - значение довольно близко к 0.25, стоит проверить предел значения доли узлов с 3-мя соседями в $J=0$ при бесконечной длине и характер приближения к нему, если таковой имеется. Значение $\langle n_2 \rangle$ при $J=0$ визуально отличается от предполагаемого $3/4$. В следующих разделах мы рассмотрим развитие значения долей $\langle n_{2-6} \rangle$ в точке $J=0$ (где модели ISAW и Ising-ISAW ведут себя идентично с обычным невзаимодействующим блужданием SAW) на разных решётках на пределе бесконечной длины.

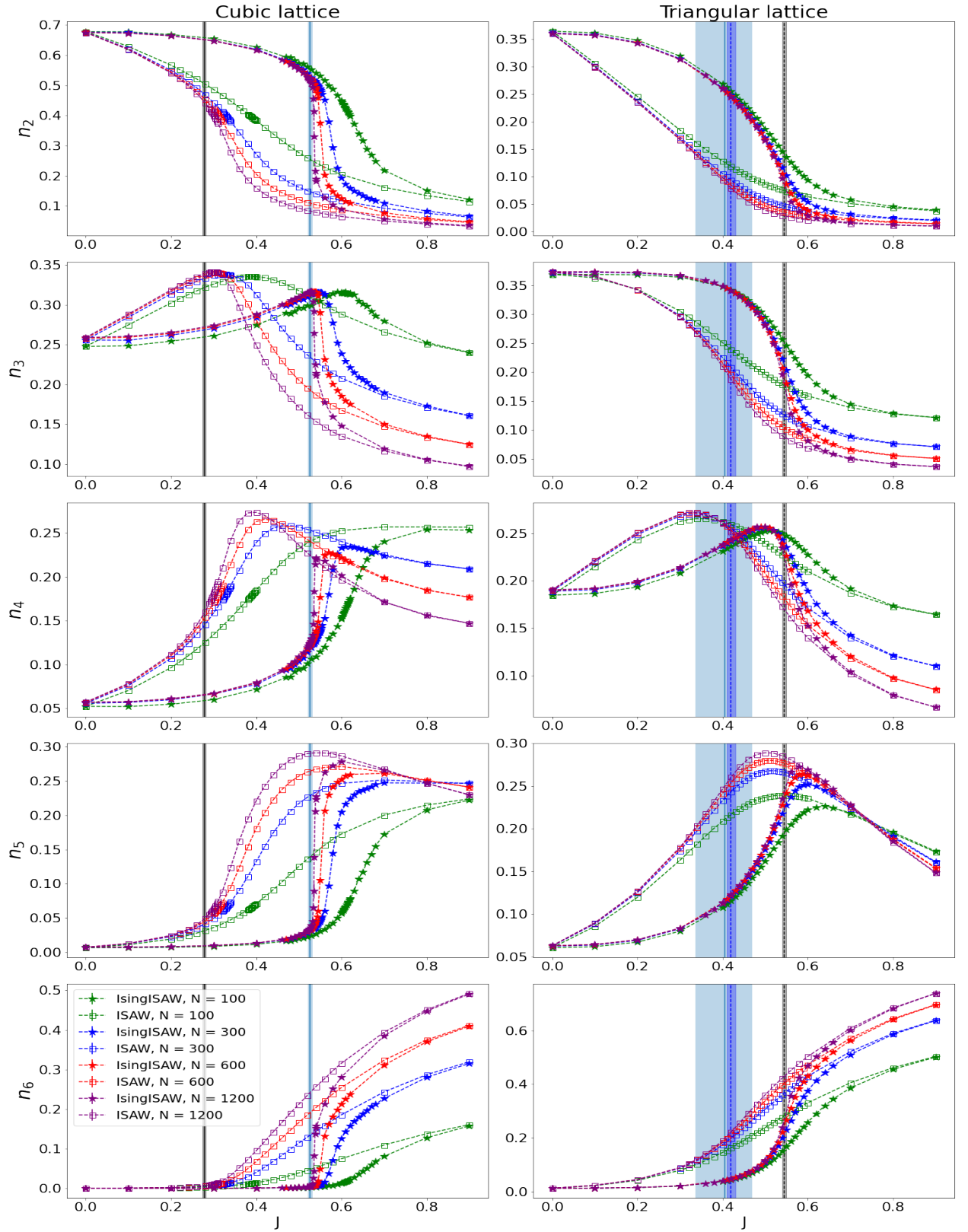


Рис. 5: Зависимость доли узлов моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW (квадраты) на кубической (слева) и треугольной решётках (справа) с 2-6 соседями (сверху вниз) от J с длинами $N = 100$ (зеленые), 300 (красные), 600 (синие) и 1200 (фиолетовые). Вертикальные линии отмечают точки фазового перехода моделей: черными отмечены точки перехода модели Ising-ISAW, синими - ISAW. Сплошные линии - известные результаты (таблица 1), пунктирные - полученные в секциях 7 и 8 (таблица 2)

3.4 Алгоритм исследования характера зависимости значения долей узлов от длины при $J=0$

Здесь рассматривается способ определения характера зависимости у графиков долей узлов с фиксированным числом соседей при $J=0$. Для примера взят случай n_2 у квадратной решётки модели Ising-ISAW. Первоначально рассматривается три возможных способа аппроксимации результатов, варьирующихся зависимостью от обратной длины конформации $x = 1/N$:

1. Линейная аппроксимация

$$y = ax + b \quad (3.1)$$

2. Лог-линейная или экспоненциальная аппроксимация

$$y = b \exp(ax) + c \quad (3.2)$$

3. Степенная или лог-лог аппроксимация

$$y = bx^a + c \quad (3.3)$$

Чтобы гарантировано получить результат использовалась функция `linregress` из пакета `scipy.stats`, поэтому на данном этапе погрешностью результатов симуляций мы временно пренебрегаем. Так же, чтобы показать нагляднее характер аппроксимации, графики соответствующих способов фитирования будут рассмотрены в том же масштабе - линейный в линейном, экспоненциальный в лог-линейном, степенном в лог-лог-масштабе - таким образом графики фитов будут линейными. Результаты аппроксимаций в порядке, изложенном в списке выше, изображены на рисунках 6а и 6б - в левом столбце аппроксимации записаны для данных цепочек с длинами от 100 до 4900, в правом - длины от 250 до 4900, чтобы оценить поведение модели на больших длинах, следовательно, ближе к нулю.

Графики на рисунках 6а и 6б показывают, что в данном случае экспоненциальная аппроксимация ведёт себя как линейная (что логично вблизи нуля), поэтому можно рассматривать вместо первых двух только линейную. С другой стороны, степенная функция совсем не совпадает с графиком результатов. Более того, значение степени функции-фита настолько мало, что итоговая функция больше похожа на константную прямую.

Таким образом, в данном случае определён линейный характер зависимости. Теперь, чтобы оценить качество приближения при рассмотрении точек всё ближе и ближе к нулю, оценим ошибку фитирования - теперь мы можем использовать функцию `curve-fit` из пакета `scipy.optimize`.

N	a	b
100-4900	-0.44(1)	0.71292(4)
250-4900	-0.473(6)	0.71299(2)
400-4900	-0.47(1)	0.71298(2)
1000-4900	-0.48(6)	0.71299(4)

Таблица 3: Значения и погрешности коэффициентов линейного фитирования (3.1) зависимости долей узлов с 2-мя соседями на квадратной решётке модели Ising-ISAW при $J=0$ от исследуемого интервала длин

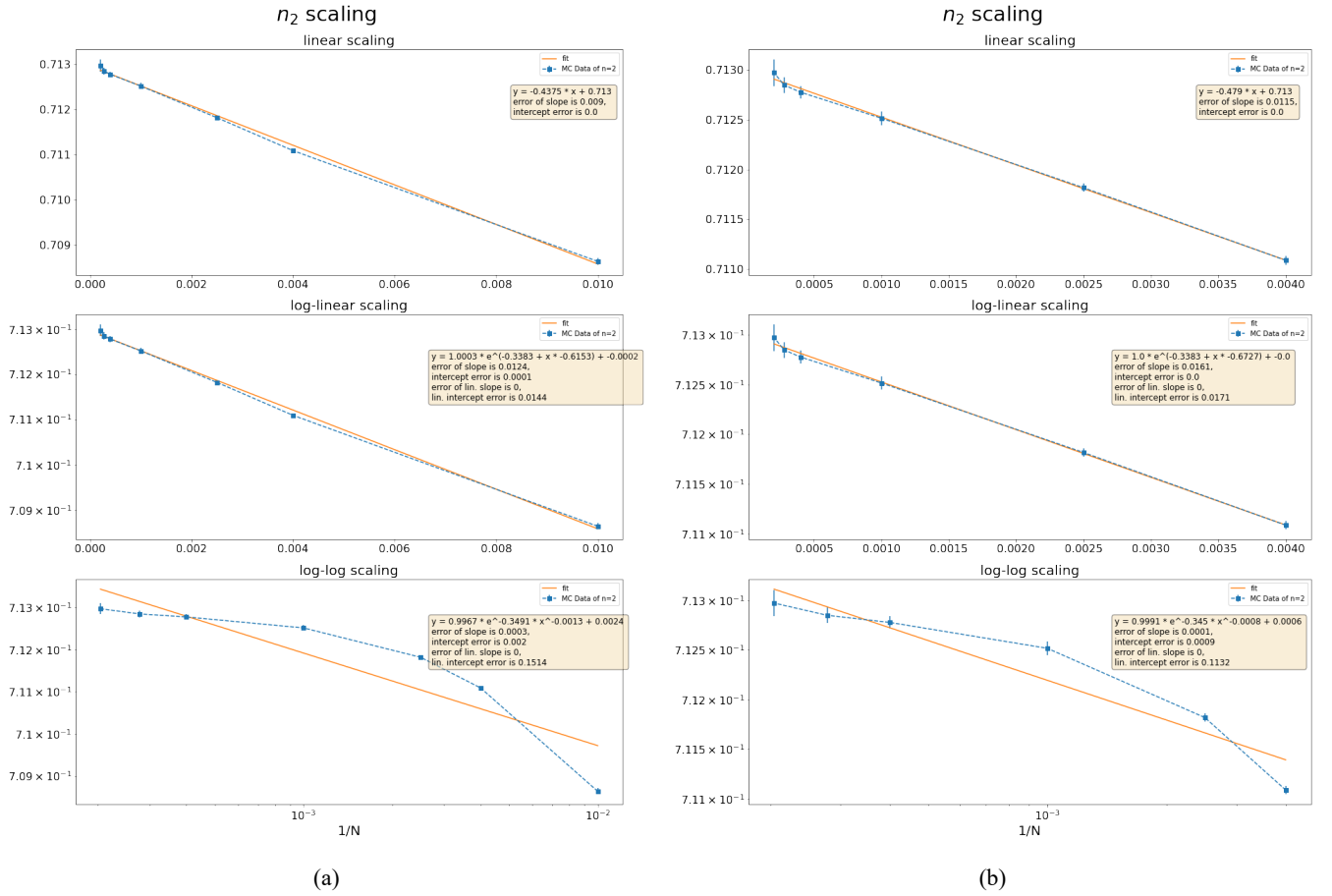


Рис. 6: Результаты аппроксимации (оранжевая линия) данных Монте-Карло о долях узлов с двумя соседями n_2 модели Ising-ISAW на квадратной решётке (синие точки) различными способами на диапазоне длин 100-4900 (a) и 250-4900 (b)

Результаты использования других диапазонов точек на таблице 3 показывают, что наиболее оптимальный фит (с наименьшей ошибкой) достигается при выборе точек от 250 до 4900. Это можно объяснить тем, что при выборе точек большего диапазона линейный характер будет выражен слабее, а при выборе точек меньшего диапазона количество рассматриваемых данных уменьшается, что приводит к росту ошибки (недостаточно статистики). Подобная операция была выполнена и для других чисел соседей и решёток (более подробные графики см. в Bulk2-6.ipynb в разделе "Расчёты .ipynb" [22]), результаты представлены в следующем разделе в виде графиков для узлов с 2-мя и 3-мя соседями и в виде таблицы коэффициентов линейного фитирования (3.1) без графиков.

Результаты линейного фитирования при выборе разной наименьшей рассматриваемой длины можно увидеть на таблицах 4 и 5. По погрешностям на первых строках обеих таблиц понятно, что оптимальным диапазоном будет 250-4900. Для 3-4D-гиперкубических решёток так же заметно (по погрешностям соответствующих строк), что отбрасывание длины $N=100$ из рассматриваемых улучшило точность результатов. Единственное исключение - треугольная решётка: на ней линейный характер результатов настолько заметен, что при отбрасывании наименьшей длины $N=100$ ошибка увеличивается (недостаточность статистики стала сильнее, а "линейность" не изменилась).

3.5 Сравнение геометрических свойств модели Изинга на треугольной решётке с квадратной в $J=0$

На графике 7 наглядно показано сравнение приближений долей "одномерных" участков (то есть, долей мономеров с двумя соседями) и узлов с тремя соседями в цепочках на квадратной, треугольной, кубической и гиперкубической решётках. Для расчётов долей на треугольной решётке были использованы длины 100-1200, для квадратной - 250-4900, для кубической и гиперкубической - 200-1200. Фитирование долей треугольной решётки имеет отчётливый линейный характер, даже в приближении на короткие длины. Линейность долей прямоугольных решёток всех размерностей также подтверждается (с учётом погрешности расчётов с наибольшей длиной).

	$\langle n_2 \rangle$		$\langle n_3 \rangle$		$\langle n_4 \rangle$	
Lattice	a	b	a	b	a	b
Square	-0.44(1)	0.71291(4)	-0.843(8)	0.25297(3)	-0.154(3)	0.03412(1)
Triangular	0.492(2)	0.35989(1)	-0.519(3)	0.37410(1)	-0.609(4)	0.19080(1)
Cubic	0.37(2)	0.67440(7)	-1.24(1)	0.26005(5)	-0.525(5)	0.05758(1)
Hypercubic	0.15(2)	0.71978(9)	-1.20(1)	0.22080(6)	-0.468(5)	0.04589(2)

Таблица 4: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (3.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 7 для длин N от 100 до 4900 (для квадратной) и 1200 (для остальных решёток)

	$\langle n_2 \rangle$		$\langle n_3 \rangle$		$\langle n_4 \rangle$	
Lattice	a	b	a	b	a	b
Square	-0.473(6)	0.71299(1)	-0.809(3)	0.25291(1)	-0.145(4)	0.03410(1)
Triangular	0.491(3)	0.35989(1)	-0.523(6)	0.37411(1)	-0.603(8)	0.19079(2)
Cubic	0.418(1)	0.67429(3)	-1.27(1)	0.26012(2)	-0.538(4)	0.05761(1)
Hypercubic	0.26(1)	0.71958(3)	-1.27(1)	0.22720(2)	-0.494(6)	0.04596(1)

Таблица 5: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (3.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 7 для длин N от 250 до 4900 (для квадратной) и от 200 до 1200 (для остальных решёток)

Из таблицы 6 по первым двум строкам, отображающим данные о прямых-фитов квадратной и треугольной решётки соответственно, сходства между одномерием треугольной и квадратной решётки с точки зрения коэффициентов фитирования a и b (3.1) почти не наблюдается - они имеют как разные значения свободных членов, так и значения и даже (в случае 2-х соседей) знаки коэффициента наклона, разница которых значительно превышает погрешность фита.

Значение свободного члена b для $\langle n_2 \rangle$, то есть предела значения долей при бесконечной длине цепочки, у квадратной и треугольной решётки (первый блок первых двух строк таблицы 6) отличается почти в два раза: 0.71299(2) и 0.35989(1) (что логично, ведь в треугольной решётке диагональные ячейки так же считаются соседними, поэтому половина поворотов конформации добавит соседей).

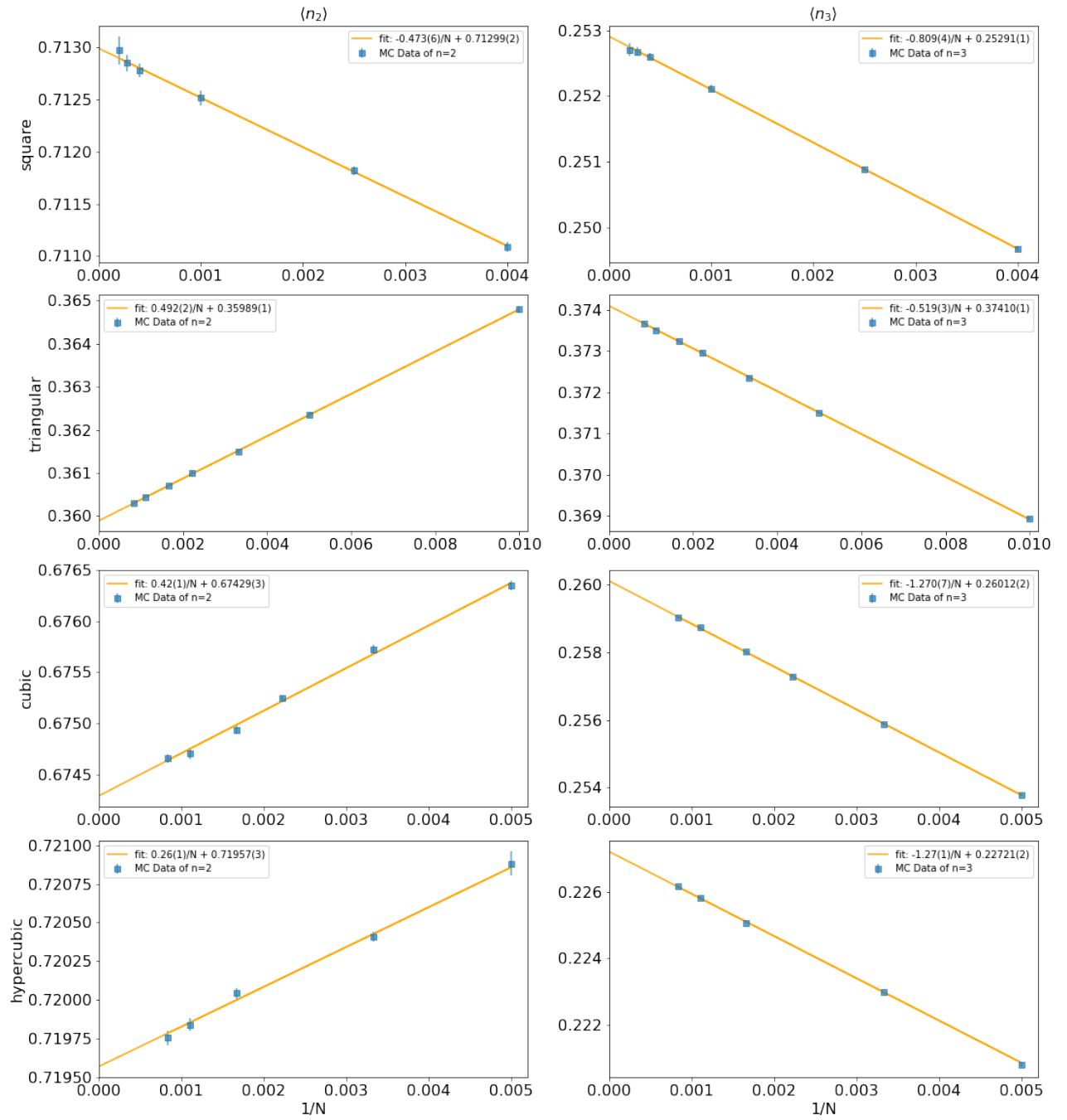


Рис. 7: Зависимость средней доли узлов с 2-мя соседями (слева) и 3-мя (справа) от обратной длины $1/N$ в модели Изинга на случайном блуждании на квадратной, треугольной, кубической и гиперкубической (сверху вниз). Синие точки описывают результаты симуляций Монте-Карло, оранжевая линия - график линейной аппроксимации результатов, ошибки рассчитаны с учётом погрешностей полученных данных. Коэффициенты и диапазоны длин рассматриваемых данных записаны в таблице 6

	$\langle n_2 \rangle$			$\langle n_3 \rangle$			$\langle n_4 \rangle$		
Lattice	a	b	N	a	b	N	a	b	N
Square	-0.473(6)	0.71299(2)	250-4900	-0.809(4)	0.25291(1)	250-4900	-0.145(4)	0.03410(1)	250-4900
Triangular	0.492(2)	0.35989(1)	100-1200	-0.519(3)	0.37410(1)	100-1200	-0.609(4)	0.19080(1)	100-1200
Cubic	0.42(1)	0.67429(3)	200-1200	-1.270(7)	0.26012(2)	200-1200	-0.538(4)	0.05671(1)	200-1200
Hypercubic	0.26(1)	0.71957(3)	200-1200	-1.27(1)	0.22721(2)	200-1200	-0.494(6)	0.04595(1)	200-1200

Таблица 6: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (3.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 7 - наилучшие приближения с подбором диапазона длин для каждого графика (в столбце N)

	$\langle n_5 \rangle$			$\langle n_6 \rangle$		
Lattice	a	b	N	a	b	N
Triangular	-0.274(2)	0.063145(6)	100-1200	-0.055(1)	0.012081(2)	100-1200
Cubic	-0.100(2)	0.007536(4)	200-1200	-0.0074(2)	0.000452(1)	200-1200
Hypercubic	-0.102(2)	0.00658(1)	200-1200	-0.0140(3)	0.000659(1)	200-1200

Таблица 7: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (3.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 5-6 соседями

3.6 Сравнение геометрических свойств модели Изинга на решётках с большим числом соседей в $J=0$

Здесь мы сравниваем линейное фитирование результатов симуляций Монте-Карло треугольной решётки с кубической, имеющей такое же количество возможных соседей, а так же результаты для гиперкубической решётки в $J=0$. Коэффициенты линейного фитирования (3.1) отображены в таблицах 6 и 7: поскольку в таких условиях плотность конформаций минимальна, доля узлов с 7 и 8 соседей в конформациях на гиперкубической решётке почти нулевая, что видно по таблице 8, поэтому мы рассматриваем число соседей лишь от 2 до 6.

Рассматривая средние строки таблицы 6, где записаны коэффициенты прямых фитирования для n_2 и n_3 треугольной и кубической решётки соответственно, а так же средние графики на рисунке 7, мы видим примерно ту же ситуацию как и в случае сравнения треугольной с квадратной - кубическая решётка на графике 7 показывает почти чёткий линейный характер приближения в пределах погрешности наибольших длин (для $n=3$ линейно видна значительно

	$\langle n_7 \rangle$			$\langle n_8 \rangle$		
Lattice	a	b	N	a	b	N
Hypercubic	-0.0011(1)	0.0000420(3)	200-1200	-0.000024(35)	0.0000010(1)	200-1200

Таблица 8: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (3.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 7-8 соседями

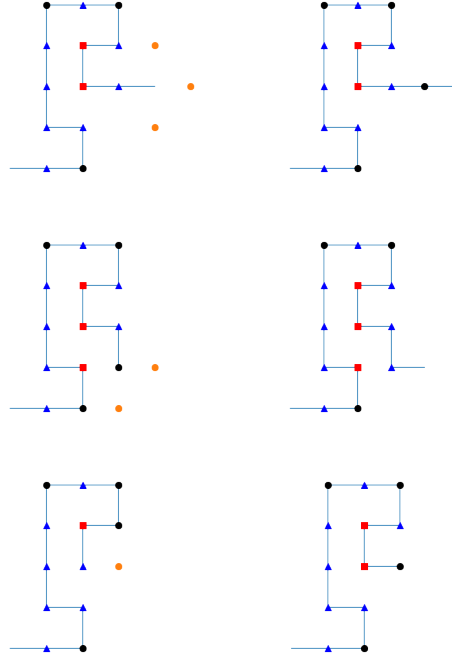


Рис. 8: Пример удлинения цепочки на квадратной решётке с атмосферой 3,2,1 (сверху вниз): слева изображена конформация до удлинения, справа - после, возможные способы добавить новый узел отмечены оранжевым, разметка узлов по количеству соседей соответствует рисунку 2

лучше), но ни коэффициенты наклона a , ни значения свободных членов b не имеют никакого сходства. Единственное отличие от сравнения с квадратной решёткой - графики соответствующих долей треугольной, кубической и гиперкубической решёток имеют одинаковое поведение с точки зрения знака наклона, что действительно и для долей узлов с большим числом соседей. Можно утверждать, что треугольная решётка с точки зрения поведения доли одномерных участков больше похожа на кубическую решётку, нежели квадратную, однако точной численной универсальности (например, почти равных в пределах погрешности коэффициентов) поведения доли "одномерных" участков между ними при бесконечно больших длинах конформации не обнаружена.

Единственная пара коэффициентов, которая оказалась равна в пределах погрешности, являются коэффициенты наклона у линейного фитирования a (3.1) для долей узлов с 3-мя соседями $\langle n_3 \rangle$ у кубической и гиперкубической решёток (см. таблицу 6).

3.7 Число соседей и атмосферы блужданий

В статье [17] в пространстве не взаимодействующих случайных блужданий без самопересечений было рассмотрено "атмосфера" блуждания - количество возможных направлений для удлинения цепочки длины N или количество возможных $N+1$ -х узлов.

Данное свойство может быть связано с числом соседей при рассмотрении процесса удлинения цепочки и такие величины, как доля узлов цепочки $\langle n_i \rangle$ с фиксированным числом соседей и вероятность конформации иметь атмосферу $k - p^{(k)}$ - по-разному описывают одно и то же поведение цепочек с точки зрения их плотности.

Рассмотрим верхний рисунок 8: если конец цепочки длины N (назовём его "N-ым узлом") имеет атмосферу три (три оранжевые точки вокруг правого конца), то при добавлении нового $N+1$ -го узла N-й будет иметь два соседа: $N-1$ -й и $N+1$ -й узлы (бывший правый конец стал черной точкой).

Так же при атмосфере 2 - как на среднем рисунке 8 - когда, уже имея два соседа (черная конечная точка) и две возможности для удлинения, N-ый узел при удлинении будет иметь 3 соседа (треугольник в том же месте на правой половине).

И наконец, при атмосфере 1 (последний рисунок 8) удлинение цепочки единственным возможным способом (одна оранжевая точка) приведёт к тому, что старый конец цепочки будет иметь 4 соседа (красный квадрат вместо треугольника). Примеры таких явлений можно увидеть на рисунке 8. Очевидно, что случай удлинения при атмосфере 0 рассмотреть невозможно, и провести аналогию с соседями нельзя.

Подобная интерпретация данных свойств в контексте удлинения цепочки показывает, что событие "цепочка длины N имеет атмосферу $3/2/1$ " при удлинении однозначно переходит к состоянию "N-й узел цепочки (теперь предпоследний) имеет $2/3/4$ соседа" соответственно.

С другой стороны, подобная интерпретация атмосферы Преллберга не учитывает перерасчёт соседей у других узлов после удлинения цепочки - так, на примере атмосферы 1 (на нижнем рисунке 8) видно, что у одного из узлов, кроме конечного (бывшая черная точка справа), так же увеличилось число соседей (с 2-х до 3-х), тем самым она стала поверхностным узлом (синим треугольником в том же месте на правой половине).

Проведём сравнение долей узлов в фикс. числом соседей в модели Ising-ISAW при $J=0$ и вероятность конформации модели невзаимодействующего блуждания иметь атмосферу k в пределе на бесконечно большую длину на квадратной решётке.

k	$p^{(k)}$	i	$b(\langle n_i \rangle)$
3	0.711 14(3)	2	0.71299(2)
2	0.225 00(2)	3	0.25291(1)
1	0.054 76(1)	4	0.03410(1)
0	0.009 096(4)	-	-

Таблица 9: Сравнение свободных членов линейных приближений вероятностей у конформации иметь n -ую атмосферу (слева) и долей мономеров с i соседями (справа) в зависимости от обратной длины конформации $1/N$

На таблице 9 слева изображены значения свободных членов графика зависимости вероятности гомополимерной цепочки иметь атмосферу k в статье [17], то есть вероятность, что второй конец цепочки бесконечно большой длины N имеет k возможных направления для удлинения и следовательно, k возможных узлов, которые могут стать новым узлом в цепочке. Справа изображены значения свободных членов приближений графиков долей узлов с i соседями. Хотя все значения отличаются больше чем на погрешность расчётов, однако нельзя не заметить довольно близкое сходство $p^{(3)}$ и свободного члена $\langle n_2 \rangle$, хотя сами приближения имеют противоположные по знаку наклоны.

В частной переписке с автором статьи была предложена следующая коррекция результатов [24]: поскольку мы рассматриваем состояние при котором удлинения точно произойдёт, то сравнивать необходимо именно условные вероятности вида $P(\text{цепочка имеет атмосферу } k \mid \text{удлинение возможно}) = P(\text{цепочка имеет атмосферу } k) / P(\text{цепочка$

имеет положительную атмосферу):

$$p^{(1/2/3)'} = p^{(1/2/3)} / (p^{(1)} + p^{(2)} + p^{(3)})$$

Рассмотрим такую ”приведённую” вероятность атмосфер и сравним с результатами для долей соседей.

k	$p^{(k) '}$	i	$b(\langle n_i \rangle)$
3	0.7177	2	0.71299(2)
2	0.2271	3	0.25291(1)
1	0.0553	4	0.03410(1)

Таблица 10: Вероятности у конформации иметь k-ю атмосферу (слева) и долей мономеров с i соседями (справа) в пределе бесконечной длины в случае гарантированно возможного удлинения

Разница между $p^{(3)'}$ и $(\langle n_2 \rangle)$ увеличилась. Остальные величины так же не удалось приравнять в пределах погрешности, что говорит о том, что величины обозначают несколько разные поведения модели.

4 Геометрические свойства простого случайного блуждания

В качестве завершения исследования поведения долей узлов с фиксированным числом соседей рассмотрим модель простого случайного блуждания (далее Random_Walk или RW) на квадратной решётке. В модели RW отсутствует ограничение самопересечений, и, следовательно, есть возможность попадания в ранее занятые узлы решётки.

Определим два геометрических свойства конформаций модели RW: из семейства SAW-моделей взято *количество шагов блуждания* N . Оно является параметром модели, и при генерации блужданий все конформации имеют фиксированное количество шагов. Добавляется новая наблюдаемая величина – *доля уникальных узлов блуждания* n_{unique} – отношение количества занятых блужданием узлов N_{unique} к количеству шагов N .

$$n_{\text{unique}} = \frac{N_{\text{unique}}}{N} \quad (4.1)$$

Как и в предыдущих разделах, исследуемыми свойствами будут величины $n_i, i \in \{1..4\}$ – *доли узлов с фиксированным числом соседей*. Так же будет рассмотрена атмосфера блужданий модели RW – *число незанятых узлов решётки вокруг конца блуждания*. В частности, исследуется поведение вероятности $p_N^{(k)}$ – доли конформаций из N шагов с атмосферой $k \in \{0..3\}$ среди сгенерированных – с увеличением количества шагов N . Доли n_i и, конечно, атмосфера k , считаются сразу среди уникальных узлов сгенерированной конформации, для чистоты результатов и возможности сравнения с данными исследования случайного блуждания без самопересечений. Все величины будут рассмотрены в виде двух функций:

- Доли узлов как функция количества шагов простого случайного блуждания N :

$$\langle n_i \rangle = f_i(N), \quad i \in \{1, 2, 3, 4, \text{unique}\} \quad (4.2)$$

- Доли узлов как функция количества уникальных узлов блуждания $N_{\text{unique}} = N n_{\text{unique}}$:

$$\langle n_i \rangle = g_i(N_{\text{unique}}), \quad i \in \{1, 2, 3, 4\} \quad (4.3)$$

Основными целями раздела будут:

1. Определение характера шкалирования наблюдаемых величин при бесконечно большом блуждании ($N \rightarrow \infty, N_{\text{unique}} \rightarrow \infty$)
2. Оценка коэффициентов фитирующих функций f_i, g_i , в особенности - асимптотического предела наблюдаемых
3. Для проверки результатов: численное сравнение фитирующих функций при прямой зависимости от кол-ва шагов $f_i(N)$ и сложной зависимости от N_{unique} , которое, в свою очередь, зависит от N $g_i(f_{\text{unique}}(N))$

4.1 Алгоритм генерации блужданий

Блуждания $\{\omega_i\}$ генерируются в виде последовательности индексов направлений $\{d_i\}$ в любой решётке, что ускоряет процесс моделирования. Первая точка блуждания на решётке ω_0 лежит в начале координат $(0,0)$, далее блуждание

определяется как последовательность узлов по формуле (4.4):

$$\{\omega_i\} = \begin{cases} \omega_0 = (0,0) & \text{steps} = [(0,1), (0, -1), (1,0), (-1,0)], \\ \omega_i = \omega_{i-1} + \text{steps}[d_i] & d_i = \text{Random}(\{0,1,2,3\}), i = 1..N, \end{cases} \quad (4.4)$$

где steps - массив фиксированных смещений из точки, определяемые законами решётки. Точность подсчёта наблюдаемых определяется лишь количеством повторов эксперимента.

С другой стороны, отсутствие требования непересекаемости блуждания вызывает ряд осложнений для сравнения результатов с классом блужданий без самопересечений. Например, возможны случаи, когда два идущих подряд направления противоположны друг другу - то есть, на i -м шаге блуждание смещается из точки ω_{i-1} , а $i+1$ -м - возвращается в него, то есть $\omega_{i-1} = \omega_{i+1}$. В таком случае на графике блуждания возможны "шипы", концы которых будут узлами с всего одним соседом - основанием "шипа".

Алгоритм обработки каждого моделируемого блуждания описан на картинках 9а, 9б и 9с:

- Из сгенерированного блуждания (рисунок 9а) отбираются все уникальные точки узлов (4.5) - образуется набор точек решётки $\{\omega_i^u\}, i = \{0, N_{\text{unique}} - 1\}$ (рисунок 9б). Так же считается доля уникальных узлов блуждания (4.1).

$$\begin{aligned} \{\omega_i^u\} &= \text{Unique}(\{\omega_i\}) \\ N_{\text{unique}} &= |\{\omega_i^u\}| \end{aligned} \quad (4.5)$$

- Для каждого уникального узла рассчитывается кол-во его соседей $c_i \in \{1,2,3,4\}$ (рисунок 9с).
- Доля узлов с k соседями считается как отношение количества уникальных узлов с k соседями к общему количеству уникальных узлов.

$$n_k = \frac{\sum_{i=0}^{N_{\text{unique}}-1} [c_i = k]}{N_{\text{unique}}} \quad (4.6)$$

4.2 Результаты симуляций

Была проведена генерация модели RW с количеством шагов $N = 10^2 - 10^4$. Доли уникальных узлов n_{unique} так же брались во внимание при симуляциях. Результаты симуляций, а так же количество итераций для каждой длины, описаны в таблице 11 и изображены на графиках 10а, 10б и 10с.¹

В следующих подразделах будет проведён анализ полученных результатов - сначала будет проведено обсуждение погрешностей данных, затем - оценка и сравнение шкалирующих функций (4.2), (4.3) для наблюдаемых величин.

¹Процесс симуляций был запрограммирован на языке Python и проводился с использованием суперкомпьютера НИУ ВШЭ. Оптимизация требовала дополнительного изменения окружения - см. технический раздел 10.1

N	M	n_{unique}	n_1	n_2	n_3	n_4
100	96430000	0.490868(8)	0.067676(3)	0.33516(1)	0.357310(7)	0.239851(9)
150	69360000	0.462622(9)	0.057825(3)	0.30787(1)	0.356280(7)	0.27802(1)
200	36140000	0.44436(1)	0.052236(4)	0.29043(1)	0.353706(9)	0.30362(2)
350	17070000	0.41251(2)	0.043761(4)	0.26070(1)	0.34590(1)	0.34963(2)
500	7720000	0.39439(2)	0.039590(5)	0.24424(2)	0.33965(2)	0.37652(3)
750	4810000	0.37559(2)	0.035672(5)	0.22759(2)	0.33188(2)	0.40487(4)
1000	2480000	0.36325(3)	0.033333(6)	0.21696(3)	0.32610(2)	0.42361(5)
3000	420000	0.32265(6)	0.02650(1)	0.18336(5)	0.30351(5)	0.4865(1)
5000	140000	0.30679(9)	0.02434(1)	0.17086(8)	0.29322(8)	0.5116(2)
6500	100000	0.2992(1)	0.02330(2)	0.16518(9)	0.28816(9)	0.5234(2)
7000	305000	0.29610(6)	0.02302(1)	0.16340(5)	0.28657(5)	0.5270(1)
8000	240000	0.29338(6)	0.02253(1)	0.16070(5)	0.28409(6)	0.5327(1)
9000	195000	0.29022(7)	0.02215(1)	0.15830(6)	0.28185(6)	0.5377(1)
10000	160000	0.28751(8)	0.02179(1)	0.15628(6)	0.27991(7)	0.5420(1)

Таблица 11: Средние доли узлов с 1-4-мя (столбцы n_1 - n_4) соседями, а так же доля уникальных узлов (столбец n_{unique}) в конформациях модели Random-Walk длин 10^2 - 10^4 (столбец N). Также изображены на графиках 10а, 10b и 10с. В столбце M выписано количество итераций алгоритма Монте-Карло.

4.3 Погрешности результатов

Полученные в данной подсекции результаты имели ранее необоснованно большие погрешности, что потребовало более тщательного исследования. Необходимо проверить распределение результатов со временем, а так же сходимость средних наблюдаемых величин и их ошибок. В качестве примера рассмотрим первую исследуемую длину $N = 100$, т.к. именно её симуляции протекают быстрее всех.

Распределение наблюдаемых долей узлов с фиксированным числом соседей 1-4, а так же доли уникальных узлов рассмотрены на гистограммах на левом графике рисунка 11 в двух моментах времени: после 10^6 шагов и после $2.5 \cdot 10^6$ шагов. На рисунке видно, что данные всех величин имеют нормальное или близко к нормальному распределению, а несимметричные склоны некоторых величин (n_1 и n_2) объясняются близостью соответствующего края к нулю.

Сходимость наблюдаемых величин можно увидеть на правом графике 11, где замеры средних проводились через каждые 4000 шагов. На графике средних заметна сходимость средней величины и уменьшение колебаний. С другой стороны, график среднего квадратического отклонения не стремится к нулю как ожидалось, а так же сходится с уменьшением колебаний к ненулевому значению. Это показывает противоречивость результатов (по крайней мере замеров ошибки - среднее явно сходится), причину чему следует искать в коде.

Для удостоверения, что причина не лежит в jit-компиляции, был проведён запуск нескомпилированного с помощью numba кода. Результаты оказались идентичны с jit-компиляцией, и следовательно проблема в другом месте.

Причиной столь больших погрешностей результатов была неверная интерпретация понятия ”ошибка среднего толковавшаяся ранее, как выборочное среднее квадратическое отклонение $\sigma(x)$ результатов симуляций x - на деле ошибкой среднего является формула вида:

$$\Delta\langle x \rangle = \sigma(x)/\sqrt{N},$$

где N - объём выборки или количество экспериментов.

4.4 Шкалирование результатов

Применим к результатам из таблицы 11 те же методы анализа, что и ранее для доли узлов с фиксированным числом соседей в СБС – определим характер шкалирования долей при стремлении длины конформации модели RW к бесконечности. Рассмотрим данные в трёх предполагаемых масштабах: в линейной, лог-линейной и лог-логарифмической масштабностях от обратной длины $1/N$ и кол-ва уникальных узлов $1/N_{\text{unique}}$. Пример исследуемых данных показан на графике 12. На нём видно, что в случае лог-лог-шкалирования (или степенного) график обретает наилучшую среди трёх масштабностей линейность. Оно же оказалось наиболее подходящим в графиках всех долей узлов n_{1-4} в обоих функциях $f_i(N)$, $g_i(N_{\text{unique}})$, а так же для зависимости n_{unique} от кол-ва шагов N .

Тогда, шкалирующая функция $f_i(N)$ рассматривается в виде:

$$f_i(N) = k_i(1/N)^{a_i} + b_i, \quad i \in \{1,2,3,4, \text{unique}\} \quad (4.7)$$

Полученные коэффициенты с погрешностями выписаны на таблице 12.

	k	a	b	N
n_1	0.3425(8)	0.417(2)	0.014(1)	3000-10000
n_2	0.573(4)	0.171(1)	0.037(2)	3000-10000
n_3	0.588(3)	0.219(3)	0.202(3)	3000-10000
n_4	-1.239(9)	0.189(3)	0.759(5)	500-10000
n_{unique}	0.831(1)	0.2049(2)	0.1616(4)	500-10000

Таблица 12: Коэффициенты степенной шкалирующей функции доли узлов от обратного количества шагов блуждания $1/N$ (4.7).

Аналогичный анализ проведён для зависимости долей узлов $n_1 - n_4$ от количества уникальных узлов N_{unique} :

$$g_i(N_{\text{unique}}) = q_i(1/N_{\text{unique}})^{s_i} + d_i, \quad i \in \{1,2,3,4\} \quad (4.8)$$

	q	s	d	N_{unique}
n_1	0.313(1)	0.479(2)	0.015(1)	967-2875
n_2	0.567(3)	0.214(1)	0.053(2)	967-2875
n_3	0.542(5)	0.244(2)	0.203(2)	967-2875
n_4	-1.20(1)	0.225(4)	0.741(5)	197-2875

Таблица 13: Коэффициенты степенной шкалирующей функции доли узлов от обратного количества уникальных узлов блуждания $1/N_{\text{unique}}$ (4.8).

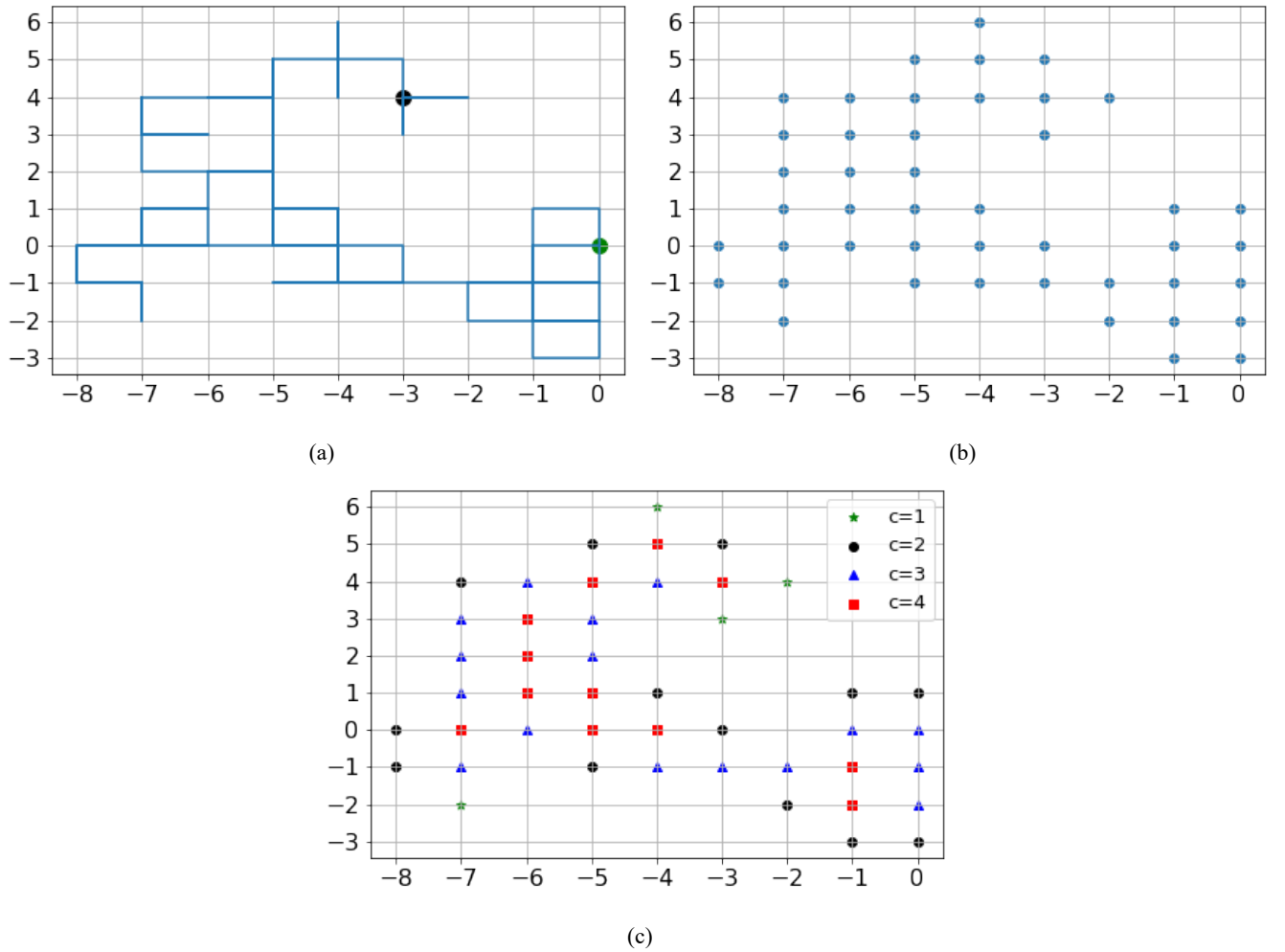
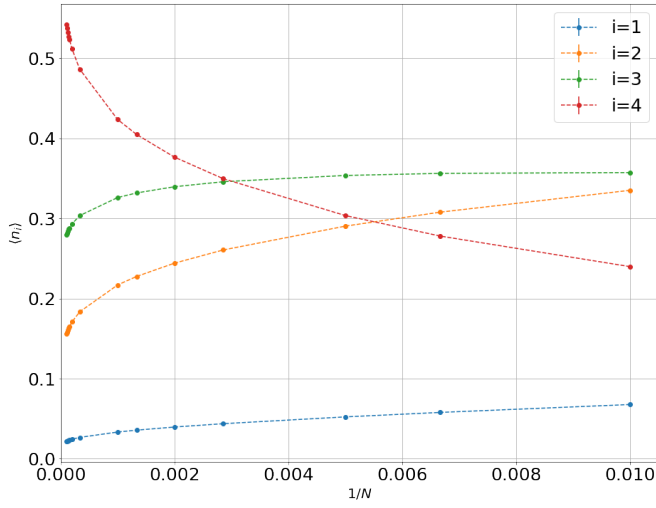
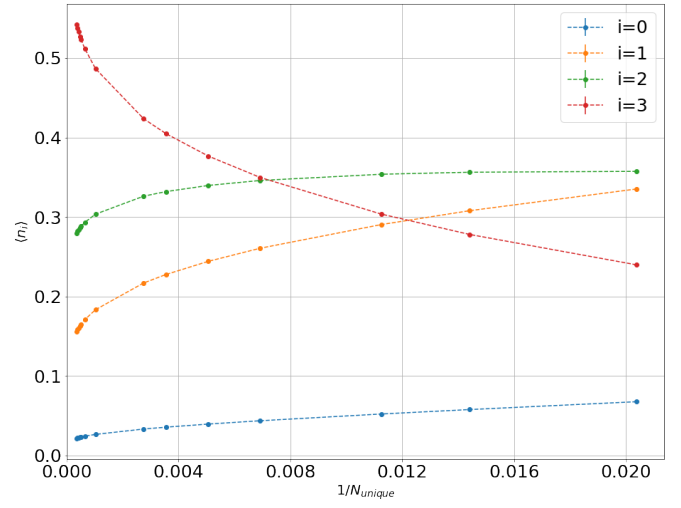


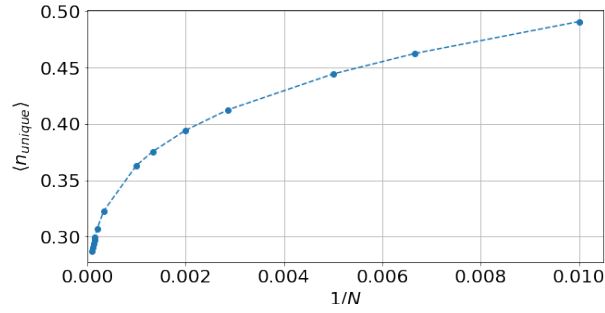
Рис. 9: а) Сгенерированное блуждание модели RW $\{\omega_i\}$ (4.4) из N шагов. Концы блуждания отмечены жирными точками, ходы блуждания – линией. Началом блуждания является зелёная точка $(0,0)$, концом блуждания – черная, в которой так же рассчитывается атмосфера блуждания k . б) Набор уникальных точек $\{\omega_i^u\}$ (4.5), принадлежащих блужданию модели RW, количество которых – N_{unique} . в) Подсчёт соседей у каждого узла блуждания - доля узлов с k соседями считается по формуле (4.6).



(a)



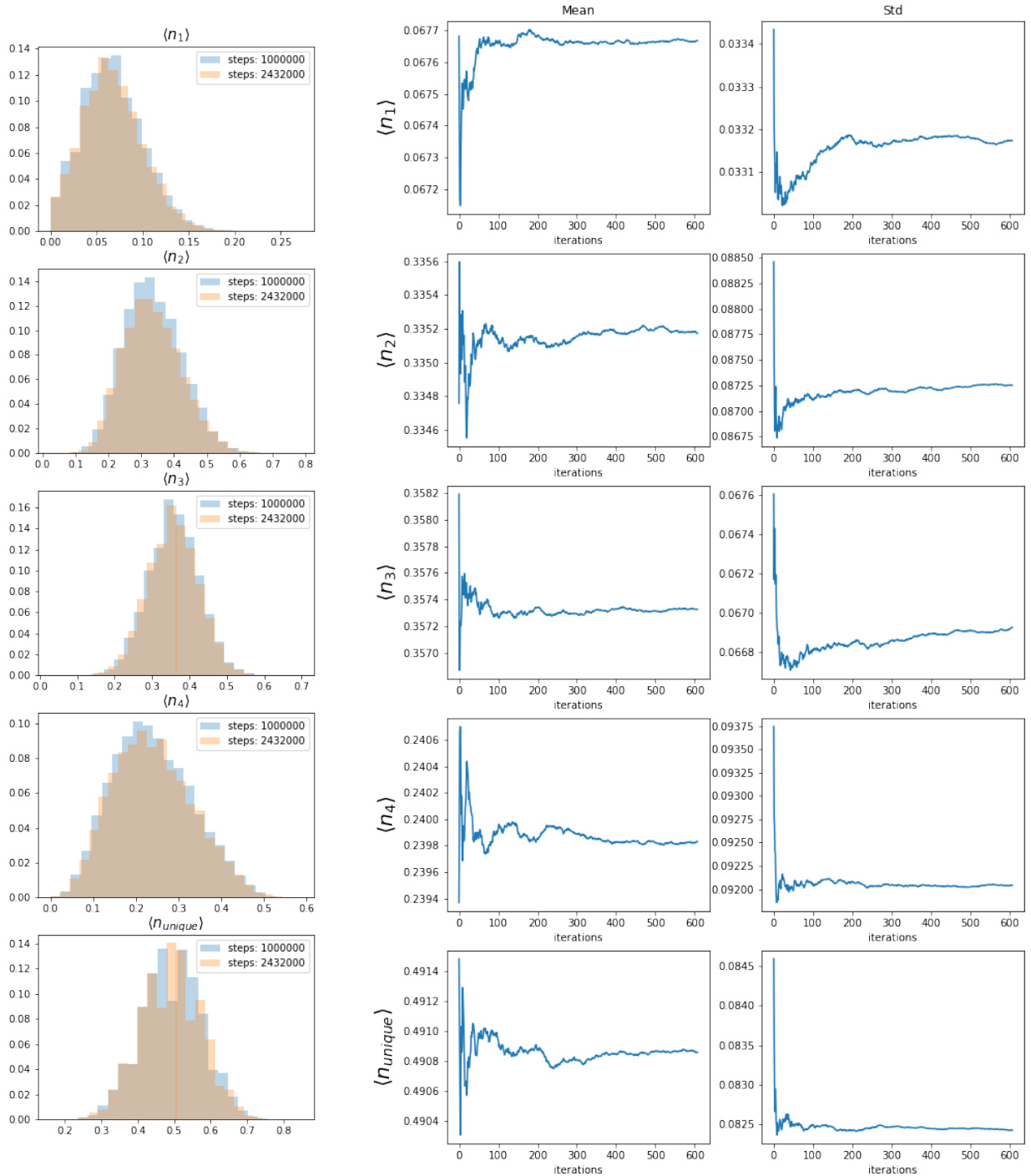
(b)



(c)

Рис. 10: Доли узлов с фиксированным числом соседей (столбцы n_1 - n_4 из таблицы 11): а) от обратного количества шагов блуждания $1/N$; б) обратного количества уникальных узлов $1/N_{\text{unique}}$; в) Доли уникальных узлов (столбец n_{unique} из таблицы 11) от обратного количества шагов блуждания $1/N$.

Рис. 11: Слева: Распределение долей узлов с 1-4 соседями и уникальных узлов блуждания длины 100 в два момента времени. Справа: История результатов (Столбец mean - средняя величина, столбец std - значение ошибки на i -м замере) долей узлов с 1-4 соседями и уникальных узлов блуждания длины 100 с интервалом замеров в 4000 шагов.



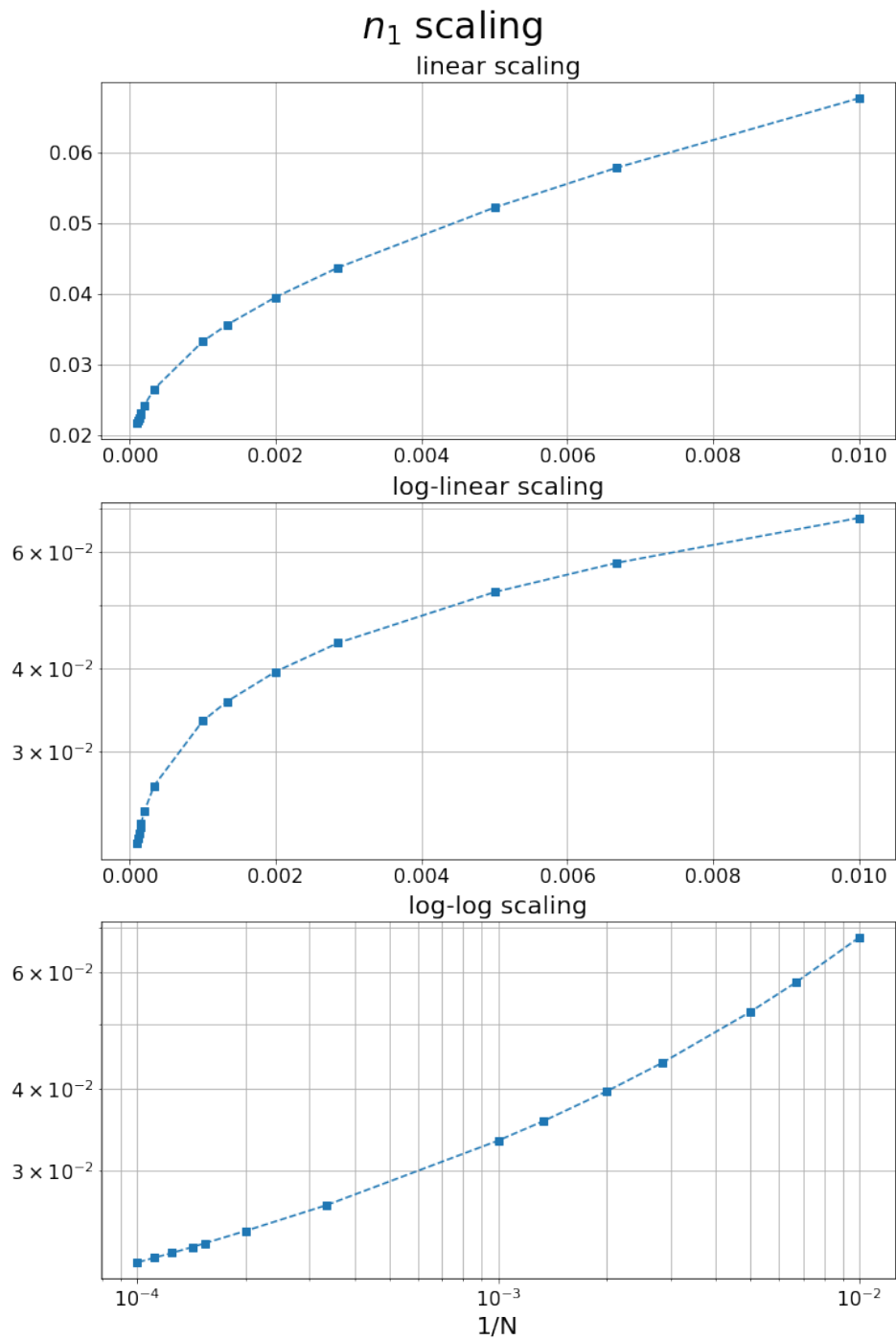


Рис. 12: Зависимость n_1 от $1/N$ в линейной, лог-линейной и лог-логарифмической масштабностях (сверху-вниз), по данным из таблицы 11.

4.5 Зависимость доли уникальных узлов от количества шагов

В данном подразделе проверяется численная эквивалентность фитирующих функций долей узлов $n_1 - n_4$: f_i (4.7), имеющей прямую зависимость от числа шагов N и $g_i(N_{\text{unique}})$ (4.8), со сложной зависимостью от N .

$$\langle n_i \rangle = g_i(N_{\text{unique}}) = q_i(1/N_{\text{unique}})^{s_i} + d_i \quad (4.9)$$

Из результатов прошлого подраздела были получены коэффициенты фитирующей функции n_{unique} (строка n_{unique} таблицы 12). Определим их как k_u, a_u, b_u соответственно и раскроем их в функции аргумента:

$$N_{\text{unique}} = N n_{\text{unique}}(N) = N(k_u(1/N)^{a_u} + b_u) \quad (4.10)$$

Рассмотрим аппроксимацию произвольной функции $g_i(N_{\text{unique}})$ с выражением её аргумента через N . Подставим (4.10) в (4.9) и проведём линеаризацию - сначала $1/N_{\text{unique}}(N)$ при $1/N \rightarrow 0$, а затем $(1/N_{\text{unique}}(N))^{s_i}$ при $1/N \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} 1) \quad & (N(b_u + k_u(1/N)^{a_u}))^{-1} = (Nb_u)^{-1}(1 + \frac{k_u}{b_u} \frac{1}{N^{a_u}})^{-1} = \frac{1}{b_u N} (1 - \frac{k_u}{b_u} \frac{1}{N^{a_u}} + O(\frac{1}{N^{2a_u}})) \\ 2) \quad & (-// -)^{s_i} = \frac{1}{(b_u N)^{s_i}} (1 - \frac{k_u}{b_u} \frac{1}{N^{a_u}} + O(\frac{1}{N^{2a_u}}))^{s_i} = \frac{1}{(b_u N)^{s_i}} (1 - \frac{k_u s_i}{b_u} \frac{1}{N^{a_u}} + O(\frac{1}{N^{2a_u}})) \end{aligned}$$

Итоговое выражение примет следующий вид:

$$g_i(N) = \frac{k_i}{b_u^{s_i}} \frac{1}{N^{s_i}} - \frac{k_i s_i k_u}{b_u^{a_i+1}} \frac{1}{N^{a_u+s_i}} + d_i + O(\frac{1}{N^{2a_u+s_i}}), \quad N \rightarrow \infty \quad (4.11)$$

Таким образом, мы свели функцию $g_i(N_{\text{unique}})$ (4.9) к функции вида (4.7), сохранив дополнительные степенные поправки. Очевидно, линеаризация повлияет на поведение в функции области небольших длин блуждания, поэтому оценивать теорически ожидаемые линейный и степенной коэффициент по полученной функции (4.5) невозможно. Это объясняет различие коэффициентов k_i, s_i .

С другой стороны, проведенные преобразования не дали никакой поправки для асимптотического предела d_i - следовательно, вне зависимости от взятого аргумента, N или N_{unique} , функции соответствующих долей узлов с фиксированным числом соседей f_i и g_i должны сходиться на бесконечности в одной точке, а столбцы b и d таблиц 12 13 соответственно - равными в пределах погрешностей. Это так же подтверждается тем, что если $N \rightarrow \infty$, то и, очевидно $N_{\text{unique}} \rightarrow \infty$, поскольку $b_u > 0$.

Рассмотрим графики трёх функций на каждую долю n_1-n_4 : как функцию $f_i(N)$, как функцию $g_i(N n_{\text{unique}}(N))$, а так же аппроксимацию второй функции (4.5).

Графики функций в линейном масштабе изображены на рисунке 13. По ним видно, что функция $f(N)$ и $g(N_{\text{unique}}(N))$ почти не имеют отличий, что говорит о полном взаимозаменяемости аргументов и правильности полученных результатов на небольших длинах. Зелёная линия соответствует аппроксимирующему виду $g(N_{\text{unique}}(N))$

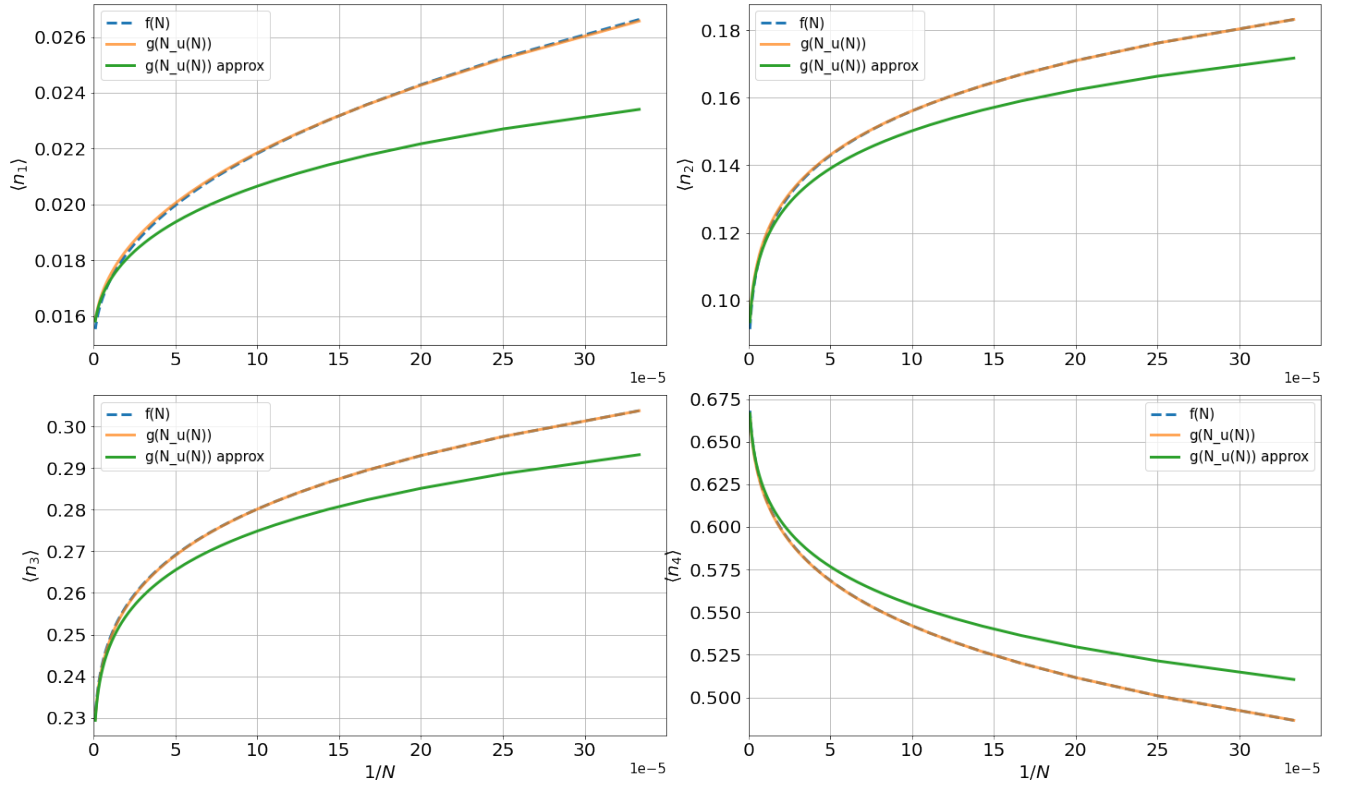


Рис. 13: Доли узлов $n_1 - n_4$ в линейном масштабе как функции от количества шагов (синий пунктир) (4.7), а так же сложные функции от количества уникальных узлов от количества шагов (оранжевая линия – прямая подстановка функций (4.10) в (4.9), зелёная - аппроксимация (4.5)), по горизонтали – обратное количество шагов блуждания $1/N$. Коэффициенты взяты из таблиц 12 и 13.

и имеет поправку, уменьшающуюся при стремлении N к бесконечности, но так же визуально сливается с первыми двумя функциями в области больших N .

Логарифмический масштаб графиков представлен на рисунке 14. Здесь ситуация выглядит совершенно иначе: на всех графиках наблюдается расхождение f_i и g_i по мере сближения с нулём. Причём теперь g_i и её аппроксимация сливаются в одну кривую (что говорит о правильности полученной линеаризацией функции (4.5)). Из прошлого раздела мы узнали, что асимптотические пределы n_1 и n_3 равны в пределах погрешности между выбранными зависимостями.

Однако пределы двух других функций как численно, так и графически расходятся между f_i и g_i , что противоречит предположениям о связи зависимостей в пределе бесконечного числа шагов блуждания.

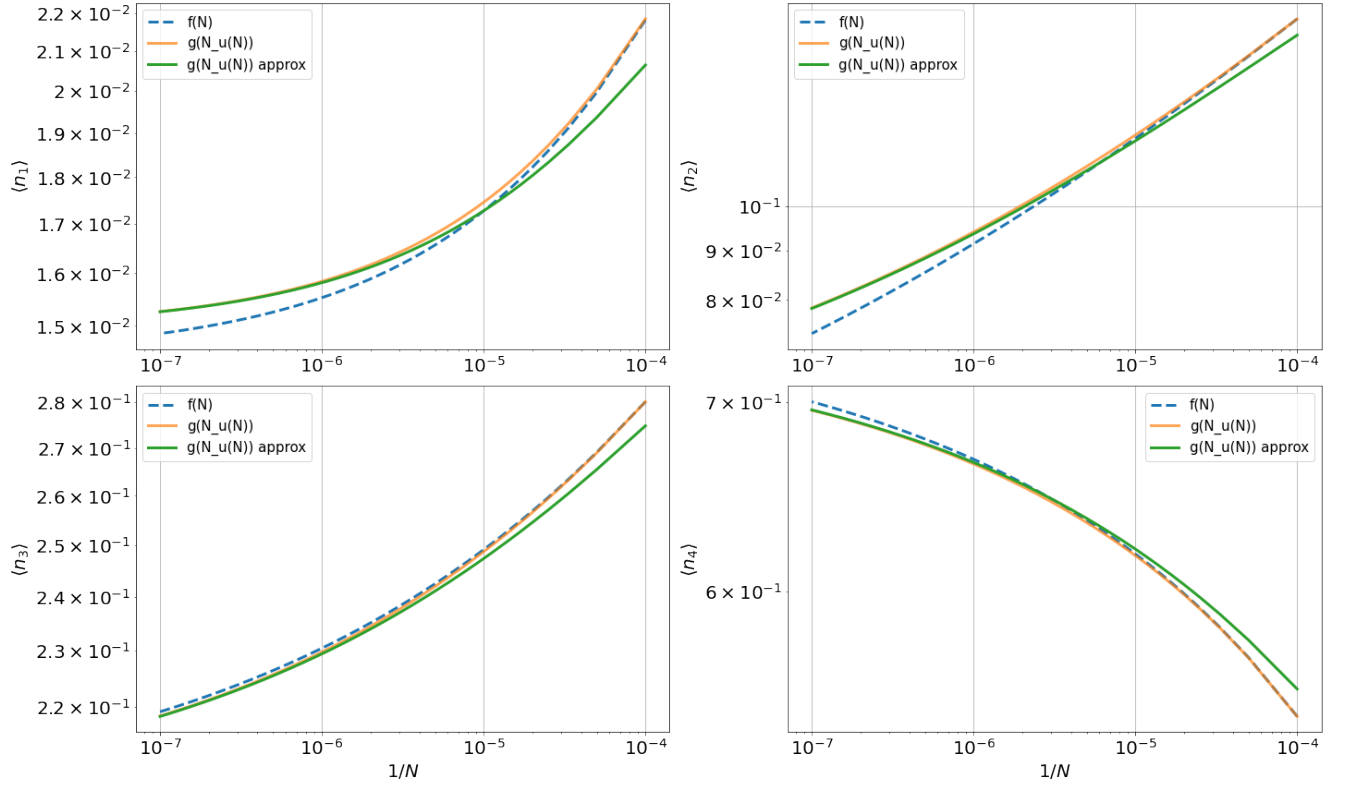


Рис. 14: Доли узлов n_1 - n_4 в лог-лог масштабе как функции от количества шагов (синий пунктир) (4.7), а так же сложные функции от количества уникальных узлов от количества шагов (оранжевая линия – прямая подстановка функций (4.10) в (4.9), зелёная - аппроксимация (4.5)), по горизонтали – обратное количество шагов блуждания $1/N$. Коэффициенты взяты из таблиц 12 и 13.

4.6 Итоговое сравнение функций долей узлов n_i

Данный подраздел завершает сравнение функций f_i (4.7) и g_i (4.8), на этот раз напрямую оценивая их сходство по линейным, степенным и свободным коэффициентам соответственно.

В первую очередь сравним свободные коэффициенты шкалирующих функций (4.7), (4.8) (столбцы b и d таблиц 12 и 13 соответственно) построчно. Очевидно, несмотря на разные структуры функций (f_i - функция от N , g_i - фактически сложная функция от N), пределы функций f_1 и g_1 , f_2 и g_2 и т.д. должны полностью совпадать, так как $N_{\text{unique}} \rightarrow \infty$ при $N \rightarrow \infty$. Так же, в виду обнаруженного степенного характера шкалирования величин при бесконечном количестве шагов, интересно различие между ближайшими к пределу результатами симуляций Монте-Карло (последняя строка таблицы 11) и полученными пределами.

	b	d	$n_i(N = 10000)$
n_1	0.014(1)	0.015(1)	0.02179(1)
n_2	0.037(2)	0.053(2)	0.15628(6)
n_3	0.202(3)	0.203(2)	0.27991(7)
n_4	0.759(5)	0.741(5)	0.5420(1)

Таблица 14: Пределы шкалирующих функций долей узлов (с фиксированным числом соседей, построчно) от N (4.7) (левый столбец), от N_{unique} (4.8) (центральный столбец) и ближайшие к пределу результаты Монте-Карло (правый столбец).

Наглядное сравнение проведено на таблице 14. Видно, что лишь у двух величин из четырех свободные коэффициенты шкалирующих функций равны между собой в пределах погрешности - это пределы долей n_1 (b_1 и d_1) и n_3 (b_3 и d_3). Другие два предела значительно отличаются – их разница многократно превышает погрешность. Однако между функциями сохраняется соразмерность пределов: как $b_1 < b_2 < b_3 < b_4$, так и $d_1 < d_2 < d_3 < d_4$.

Так же особо примечательна огромная разница между результатами симуляций Монте-Карло и соответствующими пределами у всех величин. Это показывает значительное влияние степенной составляющей функций вблизи $1/N \rightarrow 0$.

	a	s
n_1	0.417(2)	0.479(2)
n_2	0.171(1)	0.214(1)
n_3	0.219(3)	0.244(2)
n_4	0.189(3)	0.225(4)

Таблица 15: Степенные коэффициенты шкалирующих функций долей узлов (с фиксированным числом соседей, построчно) от N (4.7) (левый столбец) и от N_{unique} (4.8) (правый столбец).

Проведём аналогичное сравнение степенных коэффициентов a и s шкалирующих функций (4.7), (4.8) относительно соответствующей наблюдаемой величины на таблице 15. Численная схожесть степенных коэффициентов функций не наблюдается ни при каких величинах n_i . Заметно, что коэффициенты функций g_i несколько больше чем у

функций f_i . Из этого можно справедливо предположить, что число уникальных узлов N_{unique} обладает более сильными геометрическими свойствами, чем количество шагов N . Это так же подтверждается результатами шкалирования доли уникальных узлов (строка n_{unique} таблицы 12) – доля уникальных узлов случайного бесконечно долгого блуждания очень небольшая, чуть больше 16%. Выходит, в бесконечно отдалённый момент времени блужданию нужно совершить в среднем больше 6 шагов, чтобы найти не посещённый ранее узел решётки.

Сохраняется соразмерность степенных коэффициентов: как $a_1 > a_3 > a_4 > a_2$, так и $s_1 > s_3 > s_4 > s_2$. Примечательно так же то, что у величин с наименьшими степенными коэффициентами среди всех четырех (n_2, n_4) имеют разные пределы функций f_i и g_i - можно предположить, что это вызвано техническими особенностями метода наименьших квадратов, использованного для оценки коэффициентов шкалирующих функций. Малое значение степенного коэффициента шкалирующей функции означает слабое движение антиградиента функции ошибок. Это даёт понимание, что фактически погрешность пределов функций f_i и g_i больше, чем была подсчитана методом ранее.

	k	q
n_1	0.3425(8)	0.313(1)
n_2	0.573(4)	0.567(3)
n_3	0.588(3)	0.542(5)
n_4	-1.239(9)	-1.20(1)

Таблица 16: Линейные коэффициенты шкалирующих функций долей узлов (с фиксированным числом соседей, построено) от N (4.7) (левый столбец) и от N_{unique} (4.8) (правый столбец).

Сравнение линейных коэффициентов изображено на таблице 16. В данном случае между функциями не наблюдается ни численного, ни соразмерного сходства - несмотря на равенство всех коэффициентов до первого знака после запятой, в пределах погрешности равенства нет.

Имеется лишь знаковое сходство – все коэффициенты функций, кроме k_4 и q_4 , положительны, что говорит о сохранении схожести функций по поведению.

В итоге, с некоторым допущением относительно используемых методов аппроксимации, мы получили примерное равенство пределов шкалирующих функций от N и от N_{unique} , что говорит о корректности полученных функций шкалирования.

5 Исследование поведения концов блужданий модели RW

Следующие разделы посвящены исследованию поведения частного случая локального координационного числа на конце блуждания, или "атмосфере" блуждания. В качестве основной наблюдаемой берётся $p_N^{(k)}$ – вероятность существования блуждания с количеством шагов N с атмосферой k . Атмосферу блуждания можно легко посчитать как разность координационного числа решётки (для квадратной - 4) и локального координационного числа (число соседей вокруг узла) на конце блуждания. В рамках симуляций Монте-Карло данная наблюдаемая считается среди сгенерированной выборки:

$$\begin{aligned} a_t &= 4 - c_{\text{end}}(t), \\ p_N^{(k)} &= \frac{\sum_{t=0}^M [a_t = k]}{\text{steps}}, \end{aligned} \quad (5.1)$$

где $c_{\text{end}}(t)$ – число соседей на конце t -го сгенерированного блуждания, M – объём сгенерированной выборки, а a_t – атмосфера t -го сгенерированного блуждания. Пример подсчёта атмосферы блуждания изображен на рисунке 15а.

Ранее исследование данного свойства проводилось в работе [17], на невзаимодействующих случайных блужданиях без самопересечений. Так же подобная задача рассматривалась в книге [21], на странице 206 под номером 9, для *возвратного простого случайного блуждания*. Задача формулируется следующим образом:

- Случайное блуждание на квадратной решётке начинается из некоторой точки $x_0 = \chi$, не лежащей в начале координат.
- Процесс случайного блуждания длится не фиксированное количество шагов, а до фиксированной *точки остановки* - до достижения блужданием начала координат $x_{\text{end}} = 0$
- До достижения точки остановки блуждание может посетить одну или несколько соседних с ним точек - $(0,1)$, $(1,0)$, $(0,-1)$, $(-1,0)$. Пусть число уникальных посещенных блужданием соседних точек $N \in \{1, 2, 3, 4\}$
- Задачей является вычислить вероятности блуждания посетить каждое возможное количество уникальных соседних точек для бесконечно удаленной от начала координат начальной точки блуждания χ :

$$p_n = \lim_{|\chi| \rightarrow \infty} P_\chi[N = n] = ?, \quad n = 1, 2, 3, 4$$

Так же в качестве подсказки было указано, что отношение $p_1 : p_2 : p_3 : p_4$ почти равно $4 : 3 : 2 : 1$. Пример возвратного блуждания с точкой остановки в начале координат изображен на рисунке 15b.

В рамках летней производственной практики (см. Отчёт о практике) задача из работы Спитцера была теоретически и экспериментально решена. Результаты расчётов можно увидеть в таблице 17:

p_1	p_2	p_3	p_4
0.393566	0.314680	0.190025	0.101729

Таблица 17: Аналитическое решение задачи из работы [21]

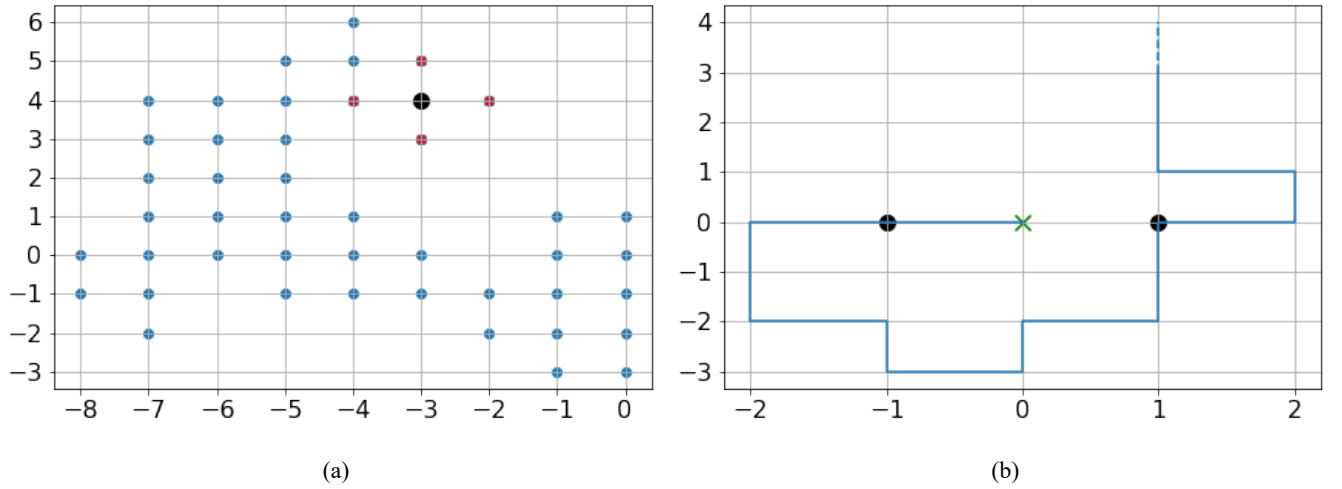


Рис. 15: а) Подсчёт атмосферы блуждания модели RW (продолжение рисунков 9). Для данного блуждания все соседние узлы его конца уже посещены ранее, атмосфера блуждания $a = 0$. б) Пример исследуемого блуждания в задаче [21]: из бесконечно удаленной точки (движение отмечено пунктиром) блуждание посетило две соседние началу координат точки (отмечены чёрным), прежде чем остановилась в нём (точка остановки отмечена зелёным крестиком).

В разделе 4.4 были найдены пределы долей узлов с фиксированным числом соседей n_i (4.6). Задачей следующих разделов, аналогично исследованию долей n_i , будет определение характера шкалирования $p_N^{(k)}$ (5.1), оценка коэффициентов шкалирующих функций, а так же сравнение асимптотических пределов вероятностей $p_N^{(k)}$ при стремлении числа шагов блуждания к бесконечности ($N \rightarrow \infty$):

1. с ответами на ранее описанную задачу [21]
2. с найденными в разделе 4.4 пределами долей n_i (4.6) (таблицы 12 и 13)

5.1 Зависимость атмосфер от количества шагов блуждания и уникальных узлов

Была рассчитана вероятность блуждания модели RW фиксированной длины N иметь атмосферу k . Под длиной блуждания N здесь имеется в виду количество случайных шагов, проделанных блужданием, без учёта, сколько уникальных узлов оно занимает. Результаты можно увидеть в таблице 18 и на графиках 16а, как функции от N , и 16б, как функции от N_{unique} .

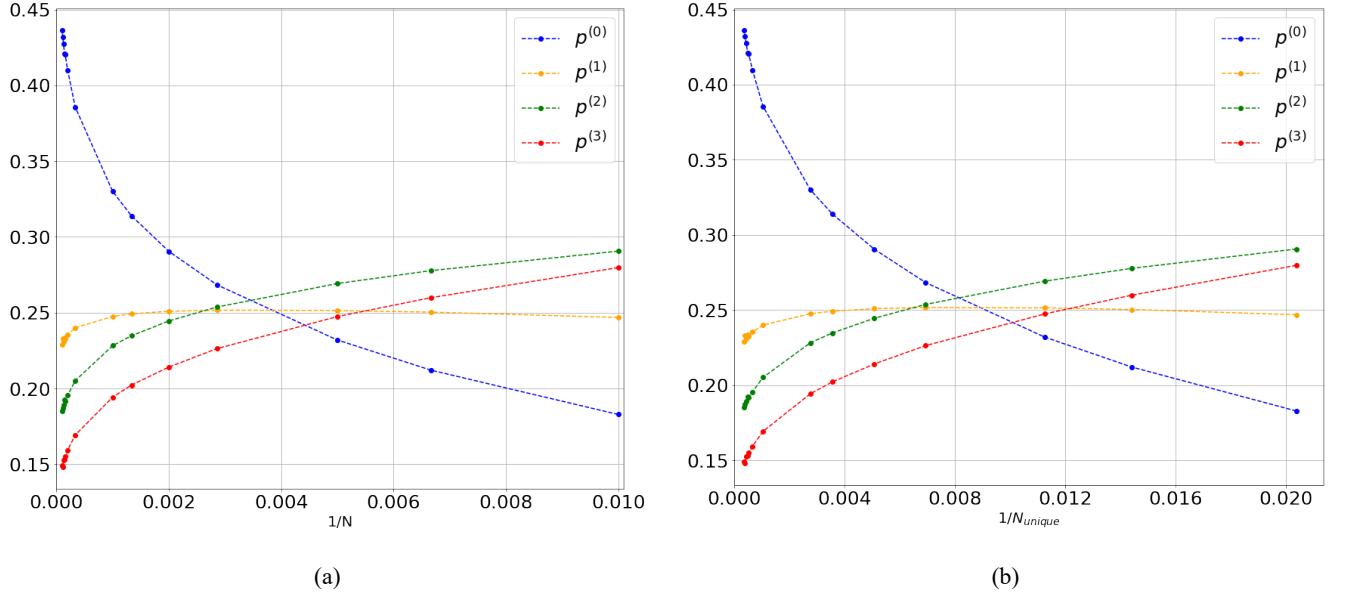


Рис. 16: Вероятность конформации модели RW иметь атмосферу $k=0,1,2,3$ (столбцы $p^{(0)}$ - $p^{(3)}$ из таблицы 18): от а) от обратного количества шагов $1/N$ (столбец N); б) от обратного количества уникальных узлов $N_{\text{unique}} = N n_{\text{unique}}$.

Первичное рассмотрение графиков зависимости вероятностей от обратной длины $1/N$ в линейной, лог-линейной и лог-логарифмической масштабностях показало, что график лучше всего выпрямляется в третьем случае. Аналогичный результат показали графики остальных вероятностей, как функций от N так и от N_{unique} . Поэтому для всех четырех вероятностей аппроксимирующая функция при $N \rightarrow \infty$ ищется так же, как и для долей узлов, в двух видах - сначала как функция от количества шагов блуждания N , по формуле (5.2).

$$p^{(i)}(N) = k_i(1/N)^{a_i} + b_i, \quad i \in \{0,1,2,3\} \quad (5.2)$$

где k_i - линейный наклонный коэффициент, a_i - степенной коэффициент, а b_i - свободный коэффициент. Оно же является пределом вероятности $p^{(i)}$ при $N \rightarrow \infty$. Для поиска коэффициентов использовался метод наименьших квадратов. Результаты аппроксимации графиков вблизи $1/N \rightarrow 0$, диапазон выбранных длин цепочек для подбора функции, а так же стартовое положение описаны в таблицах 19 и 20.

$$p^{(i)}(N_{\text{unique}}) = q_i(1/N_{\text{unique}})^{s_i} + d_i, \quad i \in \{0,1,2,3\} \quad (5.3)$$

Графики зависимости от $1/N$ представлены на рисунках 17.

Небольшие отклонения графиков аппроксимирующей функции от прямолинейного вида обусловлены наличием ненулевого свободного линейного члена, не входящего в классическую лог-лог регрессию $y = b * x^a$. Больше всего

N	M	n_{unique}	$p^{(0)}$	$p^{(1)}$	$p^{(2)}$	$p^{(3)}$
100	96430000	0.490868(8)	0.182831	0.246855	0.290593	0.279720
150	69360000	0.462622(9)	0.212044	0.250342	0.277737	0.259877
200	36140000	0.44436(1)	0.231971	0.251413	0.269204	0.247413
350	17070000	0.41251(2)	0.268341	0.251656	0.253724	0.226279
500	7720000	0.39439(2)	0.290471	0.250914	0.244515	0.214100
750	4810000	0.37559(2)	0.313906	0.249196	0.234730	0.202167
1000	2480000	0.36325(3)	0.329962	0.247547	0.228218	0.194273
3000	420000	0.32265(6)	0.385626	0.239993	0.205155	0.169226
5000	140000	0.30679(9)	0.409736	0.235407	0.195493	0.159364
6500	100000	0.2992(1)	0.420400	0.232740	0.191620	0.155240
7000	305000	0.29610(6)	0.421036	0.233311	0.192348	0.153305
8000	240000	0.29338(6)	0.427387	0.230854	0.189233	0.152525
9000	195000	0.29022(7)	0.431959	0.232795	0.187205	0.148041
10000	160000	0.28751(8)	0.436369	0.229075	0.185300	0.149256

Таблица 18: Результаты экспериментов, описанных на графиках 16a и 16b: столбцы $p^{(0)}$ - $p^{(3)}$ показывают среднюю вероятность $p_N^{(k)}$ (5.1) блуждания модели RW с количеством шагов N иметь атмосферу 0-3 соответственно, объём сгенерированной выборки блужданий для каждой длины записан в столбце M .

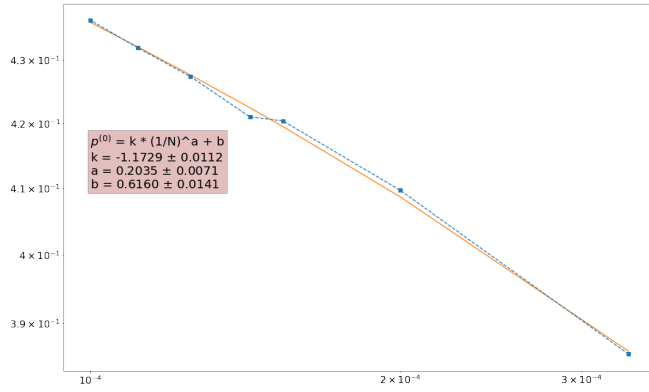
сомнений вызывает график $p^{(1)}$ в виду сильных колебаний долей блужданий с атмосферой 1 при больших длинах. Остальные графики $p^{(0)}$, $p^{(2)}$ и $p^{(3)}$ всё же подтверждают степенной (и что наиболее важно, с сильно отличными от нуля степенными коэффициентами) характер сходимости вблизи области бесконечно большой длины.

	k_i	a_i	b_i	N	start
$p^{(0)}$	-1.17(1)	0.202(7)	0.62(1)	3000-10000	-1, 1, 0.4
$p^{(1)}$	0.54(1)	0.37(3)	0.213(6)	3000-10000	0.5, 0.5, 0.245
$p^{(2)}$	0.596(4)	0.272(6)	0.137(4)	1000-10000	0.5, 0.5, 0.16
$p^{(3)}$	0.613(5)	0.259(6)	0.092(4)	750-10000	0.5, 0.5, 0.15

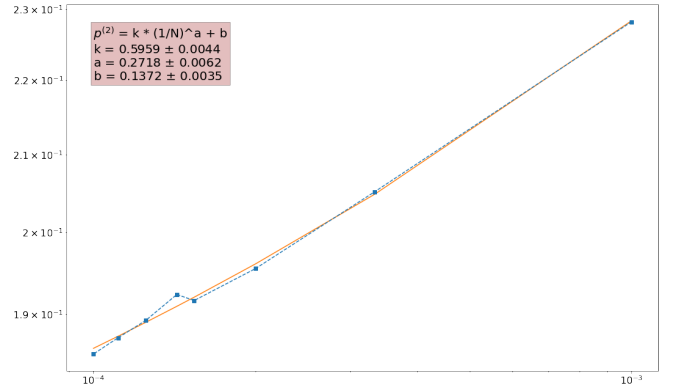
Таблица 19: Коэффициенты степенных функций, аппроксимирующих вероятности $p^{(0)}$ - $p^{(3)}$ от $1/N$ по формуле (5.2), описанных на графиках 17. Столбец start показывает начальное приближение коэффициентов в методе наименьших квадратов.

	q_i	s_i	d_i	N_{unique}	start
$p^{(0)}$	-1.142(9)	0.25(1)	0.59(2)	1533-2875	-1, 1, 0.7
$p^{(1)}$	0.52(1)	0.44(4)	0.214(6)	967-2875	0.5, 0.5, 0.23
$p^{(2)}$	0.585(5)	0.323(7)	0.141(3)	363-2875	0.5, 0.5, 0.16
$p^{(3)}$	0.604(5)	0.310(6)	0.097(3)	281-2875	0.5, 0.5, 0.15

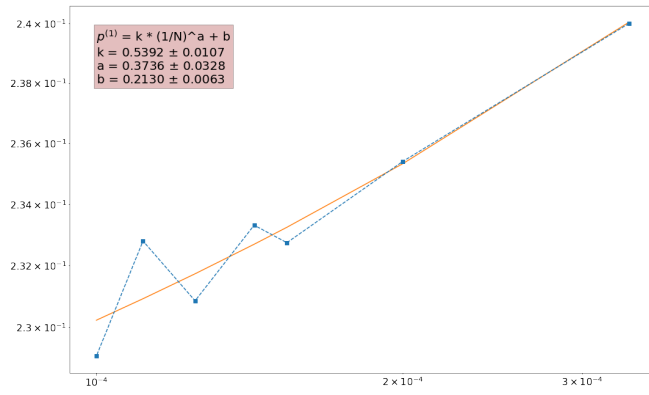
Таблица 20: Коэффициенты шкалирующих функций вероятности $p^{(0)}$ - $p^{(3)}$ от $1/N_{\text{unique}}$ по формуле (5.3). Столбец start показывает начальное приближение коэффициентов в методе наименьших квадратов.



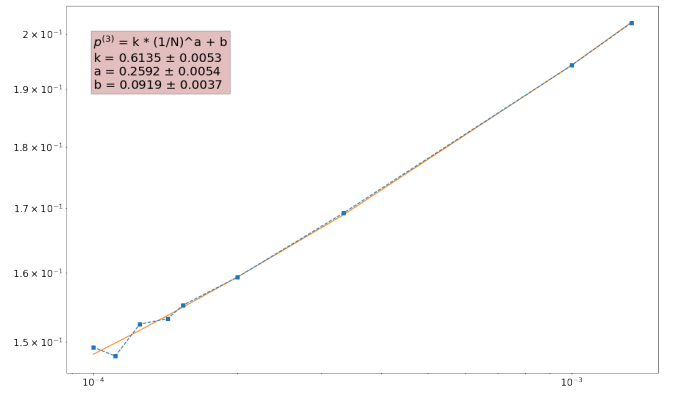
(a) $p^{(0)}(N)$



(c) $p^{(2)}(N)$



(b) $p^{(1)}(N)$



(d) $p^{(3)}(N)$

Рис. 17: Вероятности блуждания иметь атмосферу 0-3 от обратной длины конформации в степенном масштабе.

5.2 Сравнение результатов вероятностей атмосфер от N и N_{unique}

Проведём, аналогично разделу 4.6, численное сравнение коэффициентов шкалирующих функций $p_N^{(k)}(N)$ и $p_N^{(k)}(N_{\text{unique}})$ из таблиц 19 и 20.

	b	d	$p^{(i)}(N = 10000)$
$p^{(0)}$	0.62(1)	0.59(2)	0.436369
$p^{(1)}$	0.213(6)	0.214(6)	0.229075
$p^{(2)}$	0.137(4)	0.141(3)	0.185300
$p^{(3)}$	0.092(4)	0.097(3)	0.149256

Таблица 21: Пределы шкалирующих функций вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой (от 0 до 3, сверху вниз) от N (5.2) (левый столбец), от N_{unique} (5.3) (центральный столбец) и ближайшие к пределу результаты Монте-Карло из таблицы 18 (правый столбец).

Как видно по таблице 21, все пределы шкалирующих функций (5.2), (5.3) при $1/N \rightarrow \infty, 1/N_{\text{unique}} \rightarrow \infty$ равны в пределах погрешности. Так же, как в случае с пределами долей узлов n_i (таблица 14), наблюдается сильное различие между ближайшими к пределу результатами симуляций (нижняя строка таблицы 18). Это показывает сильное влияние степенного шкалирования результатов вблизи нуля аргументов функций: чем меньше степенной коэффициент (a и s для $p_N^{(k)}(N)$ и $p_N^{(k)}(N_{\text{unique}})$ соответственно), тем больше абсолютная разница между пределом и ближайшим экспериментом (сильнее ”загиб” функции у $1/N \rightarrow 0$, как видно на графиках 16).

	a	s
$p^{(0)}$	0.202(7)	0.25(1)
$p^{(1)}$	0.37(3)	0.44(4)
$p^{(2)}$	0.272(6)	0.323(7)
$p^{(3)}$	0.259(6)	0.310(6)

Таблица 22: Степенные коэффициенты шкалирующих функций вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой (от 0 до 3, сверху вниз) от N (5.2) (левый столбец), от N_{unique} (5.3) (правый столбец).

При сравнении коэффициентов a и s функций (5.2) и (5.3) соответственно, проиллюстрированном в таблице 22, численное равенство между функциями одинаковых величин почти не наблюдается. Исключением является пара a_1 и s_1 , касающиеся друг друга в пределах погрешностей, но в отсутствии закономерностей среди других величин, совпадение может быть случайно. С другой стороны, аналогично сравнению степенных коэффициентов функций долей узлов (5.2) и (5.3) в разделе 4.6, наблюдается соразмерность степенных коэффициентов ($a_1 > a_2 > a_3 > a_0$ и $s_1 > s_2 > s_3 > s_0$). Заметно также, что все степенные коэффициенты s функций $p_N^{(k)}(N_{\text{unique}})$ больше аналогичных коэффициентов a функций от N . Получим, что число уникальных узлов N_{unique} с точки зрения степенного коэффициента является более сильным аргументом для функций вероятностей $p_N^{(k)}$, что логично, ведь атмосфера блуждания напрямую зависит от заполненности решетки посещёнными или уникальными узлами.

Линейные коэффициенты k, q функций (5.2) и (5.3) изображены для наглядности на таблице 23 и так же содер-

	k	q
$p^{(0)}$	-1.17(1)	-1.142(9)
$p^{(1)}$	0.54(1)	0.52(1)
$p^{(2)}$	0.596(4)	0.585(5)
$p^{(3)}$	0.613(5)	0.604(5)

Таблица 23: Линейные коэффициенты шкалирующих функций вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой (от 0 до 3, сверху вниз) от N (5.2) (левый столбец) и от N_{unique} (5.3) (правый столбец).

жат схожие друг другу закономерности. Коэффициенты при $p^{(1)}$ чуть касаются друг друга в пределах погрешности, при $p^{(2)}$ линейные показатели близки, но чуть-чуть расходятся в пределах ошибок, в то время как k_3 и q_3 равны в пределах погрешности. Пара коэффициентов k_0 и q_0 сильно отличаются по сравнению с ошибками, однако имеют одинаковый отрицательный знак.

В итоге мы наблюдаем ожидаемое равенство пределов $p^{(i)}$ как функций от N (5.2), так и от N_{unique} (5.3). Остальные поведенческие показатели (линейные и степенные) отличаются, что говорит об отсутствии полной численной взаимозаменяемости таких величин, как число шагов блуждания N и число уникальных узлов блуждания N_{unique} . Несмотря на это, функции величин от обоих аргументов универсальны по пределу и в знаковом поведении. Это позволило увидеть большую информативность числа уникальных узлов N_{unique} как аргумента наблюдаемых величин.

6 Сравнение поведения атмосфер блужданий $p_N^{(k)}$ и долей узлов n_i модели RW

Формула (5.1), описывающая атмосферу a_t блуждания модели RW через число соседей конца блуждания n_{end} , ранее исследованное в разделе 4, указывает на возможное сходство свойств модели RW. Очевидно, атмосфера характеризует локальное координационное число блуждания в его конечном узле, однако сходство необходимо искать между долей узлов с v соседями и вероятностью $4 - v$ атмосферы блуждания, где $v = \{1, 2, 3, 4\}$. В данном разделе будет проведено сравнение ранее полученных результатов для долей узлов n_i (в разделе 4) и вероятностей атмосферы $p_N^{(k)}$ (в разделе 5). Сравнение будет проведено для каждой группы функций по отдельности: для функций от N (формула (4.7) и (5.2)) и от N_{unique} (формула (4.8) и (5.3))

6.1 Сравнение функций от N_{unique}

Рассмотрим оценки коэффициентов шкалирующих функций от N_{unique} (таблицы 13 для n_i и 20 для $p_N^{(k)}$).

v	$d(n_v)$	$d(p^{(4-v)})$
1	0.015(1)	0.097(3)
2	0.053(2)	0.141(3)
3	0.203(2)	0.214(6)
4	0.741(5)	0.59(2)

Таблица 24: Пределы шкалирующих функций от N_{unique} : долей узлов с v соседями (центральный столбец) и вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой $4 - v$ (правый столбец) от N_{unique} (столбцы d в таблицах 13 для n_i и 20 для атмосфер).

По таблице 24 видно, что несмотря на соразмерность пределов, в границах погрешностей они значительно отличаются.

v	$s(n_v)$	$s(p^{(4-v)})$
1	0.479(2)	0.310(6)
2	0.214(1)	0.323(7)
3	0.244(2)	0.44(4)
4	0.225(4)	0.25(1)

Таблица 25: Степенные коэффициенты шкалирующих функций от N_{unique} : долей узлов с v соседями (центральный столбец) и вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой $4 - v$ (правый столбец) от N_{unique} (столбцы s в таблицах 13 для n_i и 20 для атмосфер).

Сравнение степенных коэффициентов (см. таблицу 25) так же не показывает какого-либо численного сходства между величинами - все значения значительно отличаются друг друга больше чем их погрешность.

v	$q(n_v)$	$q(p^{(4-v)})$
1	0.313(1)	0.604(5)
2	0.567(3)	0.585(5)
3	0.542(5)	0.52(1)
4	-1.20(1)	-1.142(9)

Таблица 26: Линейные коэффициенты шкалирующих функций от N_{unique} : долей узлов с v соседями (центральный столбец) и вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой $4 - v$ (правый столбец) от N_{unique} (столбцы s в таблицах 13 для n_i и 20 для атмосфер).

Среди линейный коэффициентов (см. таблицу 26) заметно лишь поведенческое сходство в виде одинаковых знаков рассматриваемых пар коэффициентов. В остальном так же численное сходство отсутствует.

6.2 Сравнение функций от N

Далее рассмотрим оценки коэффициентов шкалирующих функций от N (данные взяты из таблиц 12 для n_i и 19 для $p_N^{(k)}$). Аналогично прошлому разделу, сравниваться будут пары среди свободных коэффициентов или пределы функций (таблица 27), степенные коэффициенты (таблица 28) и, наконец, линейные коэффициенты (таблица 29)

v	$b(n_v)$	$b(p^{(4-v)})$
1	0.014(1)	0.092(4)
2	0.037(2)	0.137(4)
3	0.202(3)	0.213(6)
4	0.759(5)	0.62(1)

Таблица 27: Пределы шкалирующих функций от N : долей узлов с v соседями (центральный столбец) и вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой $4 - v$ (правый столбец) от N_{unique} (столбцы b в таблицах 12 для n_i и 19 для атмосфер).

v	$a(n_v)$	$a(p^{(4-v)})$
1	0.417(2)	0.259(6)
2	0.171(1)	0.272(6)
3	0.219(3)	0.37(3)
4	0.189(3)	0.202(7)

Таблица 28: Степенные коэффициенты шкалирующих функций от N : долей узлов с v соседями (центральный столбец) и вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой $4 - v$ (правый столбец) от N_{unique} (столбцы s в таблицах 12 для n_i и 19 для атмосфер).

v	$k(n_v)$	$k(p^{(4-v)})$
1	0.3425(8)	0.613(5)
2	0.573(4)	0.596(4)
3	0.588(3)	0.54(1)
4	-1.239(9)	-1.17(1)

Таблица 29: Линейные коэффициенты шкалирующих функций от N : долей узлов с v соседями (центральный столбец) и вероятностей блужданий с фиксированной атмосферой $4 - v$ (правый столбец) от N (столбцы k в таблицах 12 для n_i и 19 для атмосфер).

Сравнение функций от N так же показало отсутствие численного сходства коэффициентов или какой-либо закономерности среди групп значений. Исключением оказалось аналогичное группе функций от N_{unique} сходство знаков линейных коэффициентов. По остальным возможным признакам сходства корреляция не наблюдается.

6.3 Итоги сравнения

О связи между долей узлов с фиксированным числом соседей $\langle n_v \rangle$ и вероятностью атмосферы $p^{(4-v)N}$ ублуждания RW существует говорит совсем немного аргументов. Во-первых, это подтверждённый степенной характер аппроксимации обеих величин как относительно числа шагов блуждания N , так и относительно числа уникальных узлов N_{unique} . Во-вторых, это сходство знаков линейных коэффициентов. Однако, если она и существует, против чего говорит полное отсутствие численного сходства между коэффициентами, то крайне слабая, ввиду разной статистической мощности наблюдаемых величин. Очевидно, что $\langle n_v \rangle$ охватывает геометрическое поведение всего блуждания, в то же как $\langle p^{(v)} \rangle$ описывает поведение лишь на его концах, характер которых с увеличением длины блуждания становится некоррелируемым с поведением внутренних узлов.

Не подтвердилась так же и универсальность свойств локального координационного числа по отношению к SAW-модели, где пределы долей узлов и вероятностей атмосфер бесконечно-больших блужданий имели значительно большее сходство (раздел 3.7), нежели в данной модели.

6.4 Планируемая деятельность

- 3-я итерация программного кода для симуляции модели Rand-Walk - добавление в модель аналога квадратной решётки с целью упрощения расчётов уникальных узлов и их соседей.

7 Критическое поведение модели IsingISAW на треугольной решётке

В данном разделе проводится исследование критической области модели Изинга на случайном блуждания без самопересечений на треугольной решётке (далее, TrIsingISAW). В отличие от классической модели на квадратной решётке, узлы треугольной решётки имеют две дополнительные связи по одной из диагоналей (см. рисунок 1), вследствие чего координационное число данной модификации (кол-во возможных связей у одного узла) увеличено до 6 (по сравнению с квадратной решёткой с 4мя возможными связями).

$$H_{N,u,\{\sigma\}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j, i, j \in u, |u| = N \quad (7.1)$$

$$\langle i,j \rangle = \{(i,j) : |i-j| = \{1, L, L+1\}\} \quad (7.2)$$

$$\langle \epsilon \rangle = \langle H \rangle / N \quad (7.3)$$

7.1 Поиск точки фазового перехода

Были проведены симуляции Монте-Карло при нулевом внешнем поле и $J \in [0, 0.9]$. Итоговое количество шагов симуляций от 10^4 до 10^5 , смоделированные блуждания имеют длину N от 100 до 7200. Были собраны данные для удельной энергии системы на спин $\langle \epsilon \rangle$ (7.3) и средняя 2-я и 4-я степени намагниченности на спин $\langle m^2 \rangle, \langle m^4 \rangle$. Так же собрана статистика среднего расстояния между концами блуждания R_N^2 .

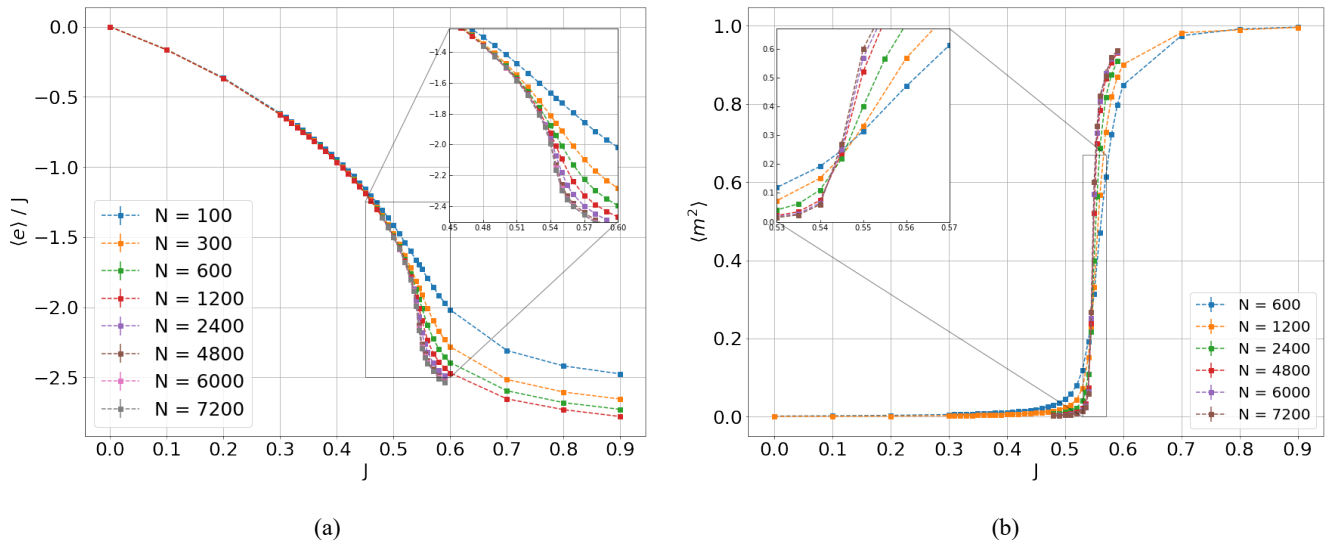


Рис. 18: Слева: удельная энергия узла (7.3) модели TrIsingISAW (без учёта константы J). Справа: средняя вторая степень намагниченности (2.9) узла модели TrIsingISAW. Длины конформаций в обоих графиках от 100 до 7200 (длины отмечены разными цветами)

На графике 18а показана зависимость удельной энергии (7.3) узла модели TrIsingISAW. График показывает что удельная энергия системы стремится к $-3J$ в пределе бесконечной длины конформации, что логично, поскольку с

ростом J узлы приобретают наиболее возможное число связей (то есть, 6), но так как связи существуют между парами узлов, необходимо поделить число связей на 2. При малых J энергия почти не зависит от длины цепочки N , но начиная с $J > 0.53$, расхождение графиков становится наиболее четким.

На графике 18b изображен момент намагниченности второго порядка (2.9) в зависимости от J . Графики величины для конформаций разных длин имеют четкое пересечение в $J \approx 0.545$. Поскольку в исследуемой модели отсутствует действие внешнего поля, магнитные свойства исходят только от спонтанной намагниченности модели. Область меньшего значения J соответствует случаю отсутствия (или нулевой) спонтанной намагниченности в системе, в то время как при $J > 0.55$ наблюдается сходимость величины к 1, что демонстрирует ферромагнитические свойства модели при высоких значениях J .

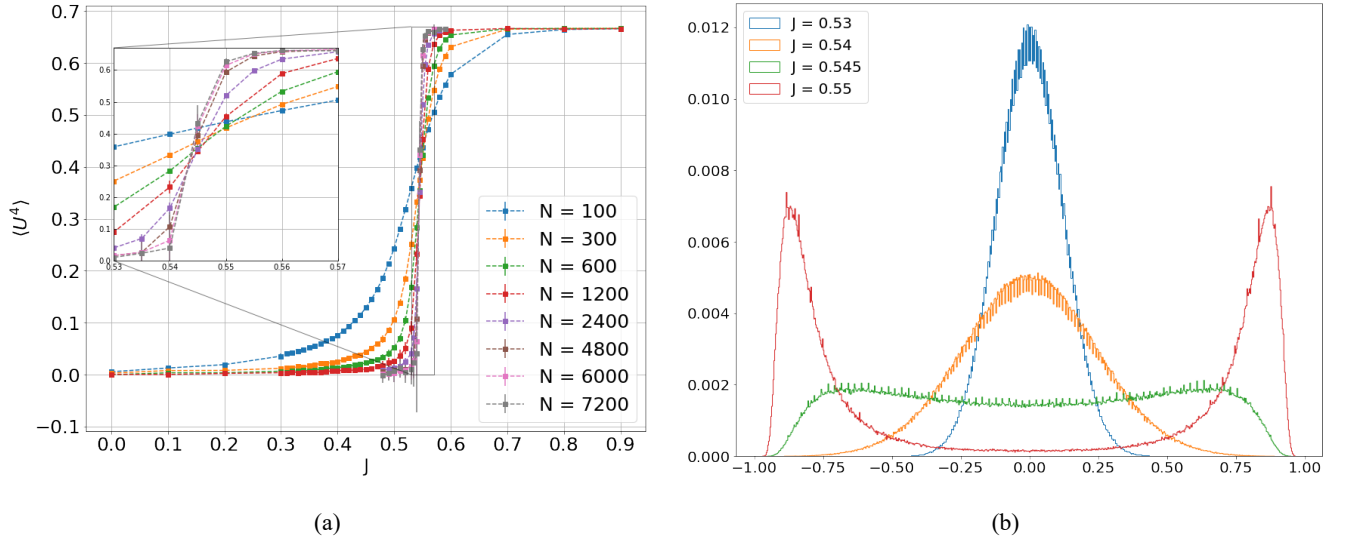
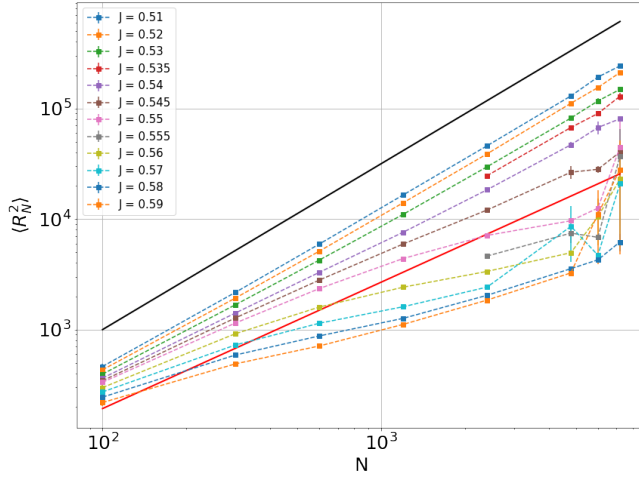


Рис. 19: Слева: кумулянт Биндера модели TrIsingISAW с длиной конформации от 100 до 7200 (длины отмечены разными цветами). Справа: распределение удельной намагниченности модели TrIsingISAW на конформации длиной $N = 7200$ при $J \in [0.53, 0.55]$ (значения J отмечены разными цветами)

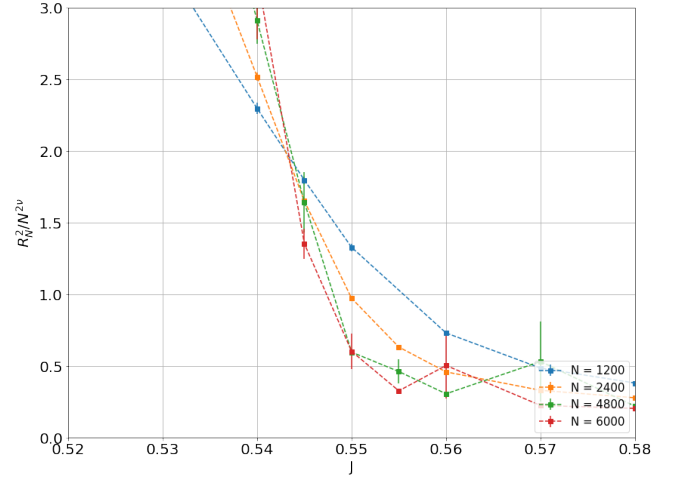
График 19a показывает зависимость кумулянта Биндера (2.10) от J . Пересечение графиков от конформаций разных длин, соответствующее переходу от парамагнитических к ферромагнитическим свойствам, снова наблюдается в $J \approx 0.545$.

Распределение значений удельной намагниченности для модели TrIsingISAW изображено на графике 19b. График показывает, что распределение с преобладающими малыми по модулю значениями удельной намагниченности уступают распределениям с преобладающими крайними значениями намагниченности возле $J = 0.545$, где распределение близко к почти равномерному.

Рассмотрим так же конформационный переход модели. Рисунок 20a описывает расстояние между концами блужданий модели TrIsingISAW как функцию длины блуждания при фиксированном значении J . Функции изображены в логарифмическом масштабе для наглядного наблюдения степенного шкалирования величины при $N \rightarrow \infty$. Так же для сравнения были добавлены прямые $N^{2\nu}$, где $\nu = 4/7$ (красная линия) - константа поведения модели ISAW на квадратной решетке в точке критического перехода [15], и $\nu = 3/4$ (черная линия) - константа поведения не взаимодействующего блуждания без самопересечений [19]. На рисунке видно, что при $J \leq 0.53$ поведение графиков близко



(a)



(b)

Рис. 20: Слева: Расстояние между концами блужданий длины N при $J \in [0.51, 0.59]$ в логарифмическом масштабе. Для наглядности добавлены линии $N^{2\nu}$, где $\nu = 4/7$ (красная линия) и $\nu = 3/4$ (чёрная линия). Справа: отношение расстояния между концами блуждания R^2 к $N^{2\nu}$, где $\nu = 4/7$ при $J \in [0.52, 0.58]$

к чёрной линии, в то время как графики с $J = 0.54, 0.545$ в значительной степени схожи к красной линии. У графиков с большим значением J , наблюдается сильное снижение наклона прямой, что говорит о более сжатом состоянии блужданий при $J \geq 0.55$.

График 20b описывает ту же величину, но перешкалированную относительно $N^{2\nu}$ в зависимости от J . Результаты показывают, что вблизи точки $J = 0.543$ величина $R^2/N^{2\nu}$ становится N -независимой.

Таким образом, на основании пронаблюдаемых магнитного (рисунки 19a и 19b) и конформационного (рисунок 20a) переходов, точка фазового перехода модели предполагается возле точки $J = 0.545$. Считая погрешностью оценки расстояние между измерениями, итоговая оценка точки фазового перехода:

$$J_c = 0.545(5) \quad (7.4)$$

Для оценки критического кумулянта, ввиду слишком большой наблюдаемой погрешности, требуются более длительные симуляции длин $N > 5000$.

7.2 Критические экспоненты модели

В данном подразделе критическое поведение модели TrIsingISAW будет исследовано в сравнении с оригинальной модификацией модели IsingISAW на квадратной решётке, рассмотренной ранее в статье [8]. Прошкалируем наблюдаемые величины $\langle R^2 \rangle$ и m^2 относительно соответствующих критических экспонент: так, величины вблизи предполагаемой точки фазового перехода рассматриваются как функции:

$$\begin{aligned}\langle R^2 \rangle &= N^{2\nu} f(x), \\ \langle m^2 \rangle &= N^{-2\beta\phi} g(x), \\ x &= (J - J_c)N^\phi,\end{aligned}\tag{7.5}$$

где ν , ϕ , β - пространственный, переходный, и порядковый показатели соответственно, в то время как $f(x)$ и $g(x)$ - безразмерные шкалирующие функции безразмерной величины. В рамках последующего анализа коллапса данных, подберём наилучшие критические показатели и точку фазового перехода, чтобы получить наиболее визуально гладкие функции $f(x)$ и $g(x)$ вблизи $x = 0$.

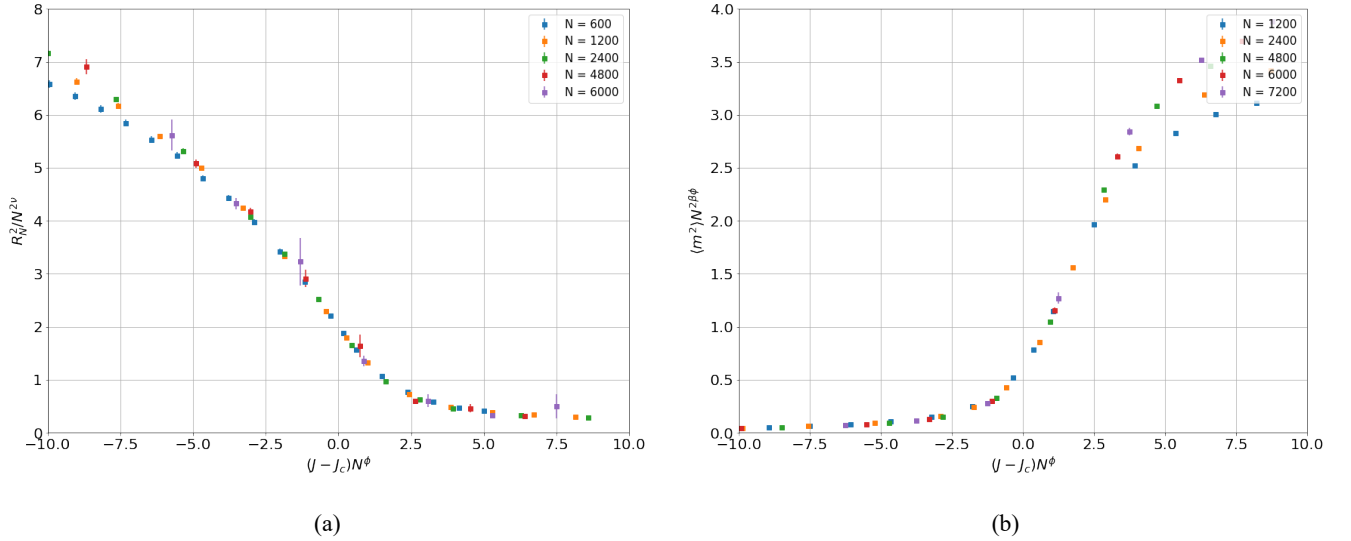


Рис. 21: Коллапс данных наблюдаемых величин модели TrIsingISAW. Слева: Расстояние между концами блужданий $\langle R_N^2 \rangle$, при $\nu = 4/7$, $\phi = 0.7$, $J_c = 0.543$, $N=[600, 6000]$. Справа: Средняя вторая степень удельной магниченности $\langle m^2 \rangle$, при $\beta = 1/8$, $\phi = 0.7$, $J_c = 0.5425$, $N=[1200, 7200]$

Графики 21a и 21b описывают наиболее гладко изображенные функции $f(x)$, $g(x)$ (7.5). В качестве показателей были взяты результаты из работы [8]. Результаты показывают, что использованные показатели при дополнительной коррекции точки фазового перехода J_c дают достаточно чёткий коллапс данных. Это подтверждает универсальность критических экспонент родительских моделей Ising 2D (модель Изинга на двумерной решётке) и ISAW 2D (взаимодействующее бесспиновое случайное блуждание без самопересечений), из которых и были ранее взяты значения экспонент, а также согласуется с оценкой критической точки выше (7.4).

8 Критическое поведение взаимодействующего блуждания без самопересечений на треугольной решётке

Основная цель данного раздела - исследование критических свойств модели ISAW на треугольной решётке (далее, TrISAW). Данная задача решалась ранее, в статье [10], с использованием приближений наблюдаемых величин рядами Тейлора. Полученная оценка точки фазового перехода для TrISAW выписана на таблице 1.

В данном разделе мы воспользуемся известными данными о скалировании радиуса между краями блуждания R_N^2 : на основании результатов о невзаимодействующем блуждании без самопересечений [19], а так же о критическом поведении взаимодействующего блуждания [15] на квадратной решётке, найдём область конформационного перехода модели и, тем самым, уточним оценку точки фазового перехода.

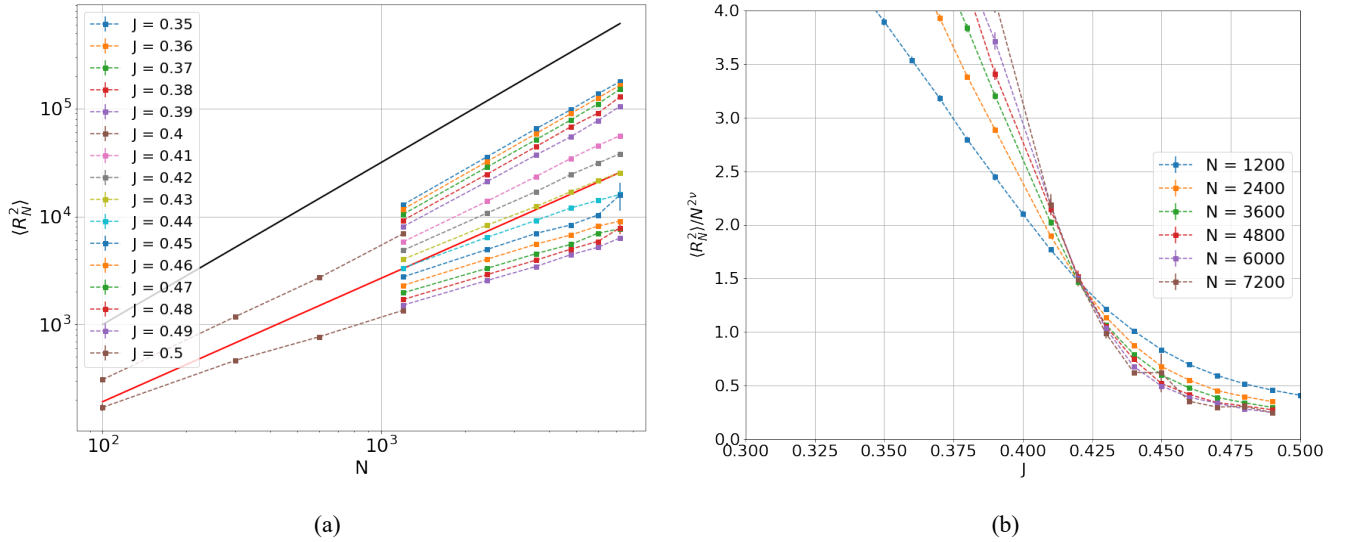


Рис. 22: а) Расстояние между концами блужданий длины N при $J \in [0.35, 0.5]$ в логарифмическом масштабе. Для наглядности добавлены линии $N^{2\nu}$, где $\nu = 4/7$ (красная линия) и $\nu = 3/4$ (чёрная линия). б) Отношение расстояния между концами блуждания R_N^2 к $N^{2\nu}$, где $\nu = 4/7$ при $J \in [0.3, 0.5]$

На левом рисунке 22а изображена зависимость радиуса между концами блуждания TrISAW R_N^2 от длины цепочки N в логарифмическом. При $J < 0.4$ скалирование радиуса R_N^2 - наклон графиков блуждания с соответствующей константой - с ростом длины цепочки приближается к поведению невзаимодействующего блуждания (черная линия с $\nu = 3/4$ [19]). В области $J \in [0.4, 0.43]$ блуждания приобретает критические свойства, и наклон графиков соответствует красной линии с показателем $\nu = 4/7$ [15]. Дальнейшее увеличение константы J приводит к уменьшению показателя ν до поведения плотной глобулы.

На правом рисунке эта же величина перешкалирована относительно $N^{2\nu}$, $\nu = 4/7$ с зависимостью от константы J . Результаты показывают почти идеальное пересечение с точкой $J = 0.42$, указывая на переход между преобладанием поправок на конечный размер блуждания и усилением скалирующих свойств величины.

Таким образом, рассматривая конформационный переход модели TrISAW, можно сделать вывод, что фазовый переход модели происходит возле точки $J = 0.42$. Считая погрешностью оценки расстояние между выполненными замерами, итоговая оценка точки фазового перехода модели ISAW на треугольной решётке:

$$J_c = 0.42(1) \tag{8.1}$$

9 Заключение

В ходе первой части работы было исследовано поведение локального координационного числа модели Изинга на СБС, а так же в модели взаимодействующего блуждания. Плотность связей была рассмотрена в модели на нескольких решётках в зависимости от константы J , а так же в состоянии нулевого взаимодействия в зависимости от длины цепочки. Методами Монте-Карло был определён линейный характер зависимости средних долей локального координационного числа в блуждании (далее, долей ЛКЧ) от длины конформации и пределы долей на бесконечно большой длине цепочки. Так же было проведено сравнение этих значений на предмет универсальности среди квадратной, треугольной, кубической и 4D-гиперкубической решёток: асимптотические пределы долей оказались численно различны среди разных решёток, однако по знаковому поведению Ising-ISAW на треугольной решётке имеет больше общего с кубической решёткой, имеющей одинаковое с треугольной координационное число, чем с квадратной, имеющей равную треугольной размерность.

Для сравнения поведения ЛКЧ между внутренним и граничным узлом конформации в пределе бесконечно большой длины цепочки, было проведено сравнение полученных для невзаимодействующей модели Ising-ISAW пределов средних долей ЛКЧ с предельными значениями вероятностей атмосфер невзаимодействующего блуждания на квадратной решётке из работы [17]. Результат показал небольшую, но значимую в пределах погрешностей разницу между величинами в пределе бесконечно длинной цепочки, что говорит о значительной различии поведений ЛКЧ в узлах близких в концах блужданий по сравнению с внутренними узлами цепочки.

Чтобы рассмотреть влияние исключенного объёма на поведение локального координационного числа, аналогичное исследование было проведено для простого случайного блуждания на квадратной решётке. Результаты симуляций показали степенной характер шкалирования долей ЛКЧ как от числа шагов случайного блуждания, так и от числа уникальных узлов блуждания. Похожим свойством обладала и атмосфера простого случайного блуждания, несмотря на гораздо большее численное отличие шкалирующих показателей между величинами, чем в невзаимодействующем СБС.

Так же проводилось исследование критических свойств моделей взаимодействующих полимеров на треугольных решётках. Точка фазового перехода модели TrIsing-ISAW значительно отличается от θ -точки оригинальной модели на квадратной решётке. С другой, стороны методом коллапса данных была подтверждена применимость ранее найденных критических показателей ν и ϕ для квадратных решёток в треугольных модификациях моделей, что говорит об универсальности ряда критических свойств среди двумерных решёток.

10 Программно-техническое приложение

В данном разделе будут описаны особенности работы с суперкомпьютером НИУ ВШЭ, которые могут быть важными дополнением к основной инструкции пользователя.

10.1 Применение jit-компиляции при программировании на языке Python

Симуляции случайного блуждания с самопересечениями (для кода см. папку *Random_Walk* [22]) были запрограммированы на языке Python с компиляцией с помощью пакета numba метод jit. В качестве окружения была использована стандартная библиотека *Python/Anaconda_v11.2021* встроенная в стандартное ПО суперкомпьютера.

Выполнение первых экспериментов по симуляциям шло крайне медленно - результаты за семь дней можно увидеть на таблице 30

N	steps	unique	n_1	n_2	n_3	n_4
100	7450000	0.49(8)	0.07(3)	0.33(9)	0.36(7)	0.24(9)
200	5684000	0.44(7)	0.05(2)	0.29(7)	0.35(5)	0.30(9)
500	2045000	0.39(6)	0.04(1)	0.24(5)	0.34(4)	0.38(8)
1000	654000	0.36(5)	0.03(1)	0.22(4)	0.33(4)	0.42(7)
2500	132000	0.33(4)	0.027(7)	0.19(3)	0.31(3)	0.48(6)
5000	37000	0.31(4)	0.024(5)	0.17(3)	0.29(3)	0.51(6)
10000	10000	0.29(3)	0.021(4)	0.16(2)	0.28(3)	0.54(5)

Таблица 30: Средние доли узлов с 1-4-мя соседями в конформациях модели Random-Walk длин $10^2 - 10^4$

Для сравнения с другими платформами, в случае длины цепочки $N = 10000$, процесс из 10000 шагов на Google Colab занимал не более 7 часов.



Решением проблемы оказалось создание собственного окружения с другими версиями используемых пакетов numpy и numba (полный список так же есть в репозитории с кодом [22]). Новые результаты за 7 дней описаны в продолжении основного раздела.

При обсуждении столь значительного различия во времени выполнения между окружениями поддержкой было выдвинуто предположение, что окружения отличаются сторонними библиотеками линейной алгебры, используемой пакетом numpy: наиболее распространенными считаются OpenBLAS и Intel MKL. Основным фактором преимущества той или иной библиотеки является именно процессор (Intel или non-Intel).

В новом окружении пакетом numpy использовалась именно библиотека OpenBLAS, в то время как в Anaconda - Intel MKL. Это следовало из применения в данных окружениях следующего:

```
import numpy
print(numpy.show_config())
```

Подробнее об определении какой библиотеки линейной алгебры используется в пакете `numpy` можно найти [здесь](#).

10.2 Итерации программного комплекса **Rand-Walk**

Подраздел посвящён описанию версий программного комплекса для симуляций модели простого случайного блуждания фиксированной длины N на квадратной решётке. (для кода см. папку *Random_Walk* [22])

1. **Drunken_Sailor_def.py** - базовый алгоритм симуляций, предназначенный для проверки работы основных функций:

- `experiment` - генерация цепочки и подсчёт наблюдаемых (доли узлов с числом соседей 1-4, а так же доля уникальных узлов цепочки)
- `complex_experiment` - запись результирующего массива для одной цепочки (`experiment`) и набора цепочек (шаг - кол-во опытов между анализом данных)
- `write_results` - запись текущих результатов (средних наблюдаемых по всем экспериментам) в текстовый файл
- `save_distr` - распределение значений наблюдаемых по всем экспериментам
- `save_history` - сохранение истории средних значений для анализа сходимости результатов симуляций

Цепочка генерируется как двумерный массив точек, потому наиболее его медленной частью является поиск уникальных узлов цепочки через `np.unique`, не поддерживающий `njit`-компиляцию при обработке двумерного массива.

2. **Drunken_Sailor.py** - первая версия симуляционного комплекса с `jit`-компилируемой частью. Алгоритмически не отличается от **Drunken_Sailor_def.py**, но значительно быстрее базовой версии
3. **Drunken_Sailor_v2.py** - оптимизированная версия **Drunken_Sailor.py** с расширенной `njit`-компиляцией:

- `create_walk` - генерация цепочки как массива поворотов блуждания начиная с начальной точки $(0,0)$, затем - как массив всех точек блуждания
- `calc_fractions` - основная функция подсчёта наблюдаемых. Так же модифицирована над подсчёт атмосферы каждого блуждания
- В `complex_experiment` добавлено распараллеливание проведение набора экспериментов за шаг между выводом данных, что позволило значительно ускорить работу комплекса.
- `stats` - подсчёт текущего результата для наблюдаемых долей
- `atm_bins` - подсчёт долей блужданий с атмосферой 0-3

Список литературы

- [1] P-G de Gennes. *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell University Press, 1979.
- [2] C. Vanderzande. *Lattice models of polymers*. Cambridge University Press, 1998.
- [3] M. Aerstens and C. Vanderzande. Ising model on a SAW. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 25:735, 1992.
- [4] Neal Madras and Alan D Sokal. The pivot algorithm: a highly efficient monte carlo method for the self-avoiding walk. *Journal of Statistical Physics*, 50(1):109–186, 1988.
- [5] N. Prokof'ev and B. Svistunov. Worm algorithms for classical statistical models. *Phys. Rev. Lett.*, 87:160601, Sep 2001.
- [6] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62:361–364, Jan 1989.
- [7] T. Garel, H. Orland, and E. Orlandini. Phase diagram of magnetic polymers. *Eur. Phys. J. B*, 12:261–268, 1999.
- [8] Kamilla Faizullina, Ilya Pchelintsev, and Evgeni Burovski. Critical and geometric properties of magnetic polymers across the globule-coil transition. *Phys. Rev. E*, 104:054501, Nov 2021.
- [9] Damien Paul Foster and Debjyoti Majumdar. Critical behavior of magnetic polymers in two and three dimensions. *Physical Review E*, 104(2):024122, 2021.
- [10] V Privman. Study of the point by enumeration of self-avoiding walks on the triangular lattice. 19(16):3287–3297, nov 1986.
- [11] W. Selke and L. N. Shchur. Critical binder cumulant in a two-dimensional anisotropic ising model with competing interactions. *Phys. Rev. E*, 80:042104, Oct 2009.
- [12] Walter Selke. Critical binder cumulant of two-dimensional ising models. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 51(2):223–228, 2006.
- [13] K. Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. *Z. Phys. B*, 43:119, 1981.
- [14] Sergio Caracciolo, Marco Gherardi, Mauro Papinutto, and Andrea Pelissetto. Geometrical properties of two-dimensional interacting self-avoiding walks at the theta-point. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44(11):115004, 2011.
- [15] B. Duplantier and H. Saleur. Exact tricritical exponents for polymers at the theta point in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 59:539, 1987.
- [16] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944.
- [17] AL Owczarek and Thomas Prellberg. Scaling of the atmosphere of self-avoiding walks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 41(37):375004, 2008.

- [18] A. Papale and A. Rosa. The Ising model in swollen vs. compact polymers: Mean-field approach and computer simulations. *Eur. Phys. J. E*, 41, 12 2018.
- [19] E.J.J.v. Rensburg. *The Statistical Mechanics of Interacting Walks, Polygons, Animals and Vesicles*. Oxford Lecture Series in Mathe. Oxford University Press, 2015.
- [20] M C Tesi, E J Janse van Rensburg, E Orlandini, and S G Whittington. Interacting self-avoiding walks and polygons in three dimensions. 29(10):2451–2463, may 1996.
- [21] Ф Спicer. *Принципы случайного блуждания*. М.: Мир, 1969.
- [22] Github repository: Chpel/projectmagnet.
- [23] Github repository: kamilla0503/saw.
- [24] Prellberg private communication 2021.