

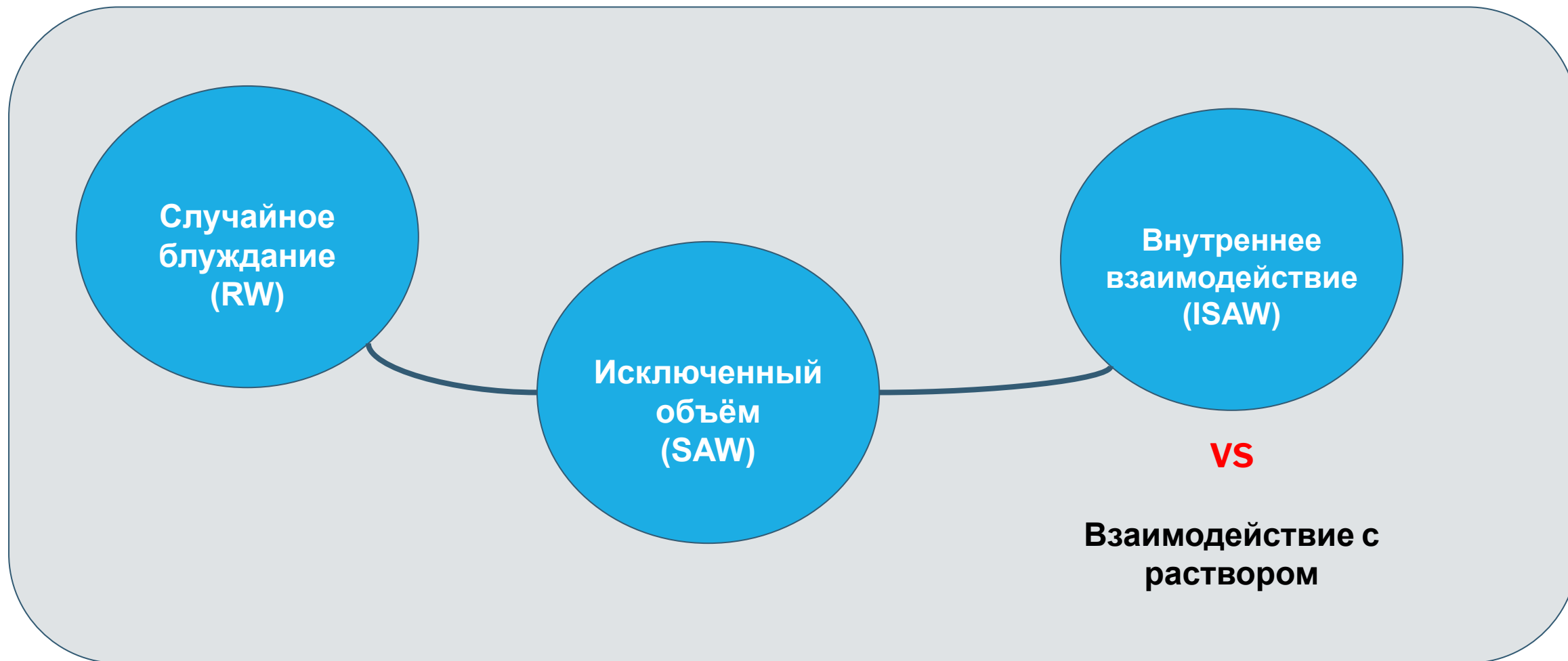
Национальный исследовательский университет
“Высшая Школа Экономики”
Московский институт электроники и математики
Департамент Прикладной математики

МАГНИТНЫЕ И ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ИЗИНГА НА СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДЕНИЯХ НА РЕШЕТКЕ

Пчелинцев Илья
Научный руководитель: доцент, Буровский Е.А.

29 мая 2023 года

ЛИНЕЙНЫЕ ПОЛИМЕРЫ



МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА СЛУЧАЙНОМ БЛУЖДЕНИИ БЕЗ САМОПЕРЕСЕЧЕНИЙ (Ising-ISAW)

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

$$Z = \sum_s \sum_u \exp\left(\frac{-E}{kT}\right), \quad kT = 1$$

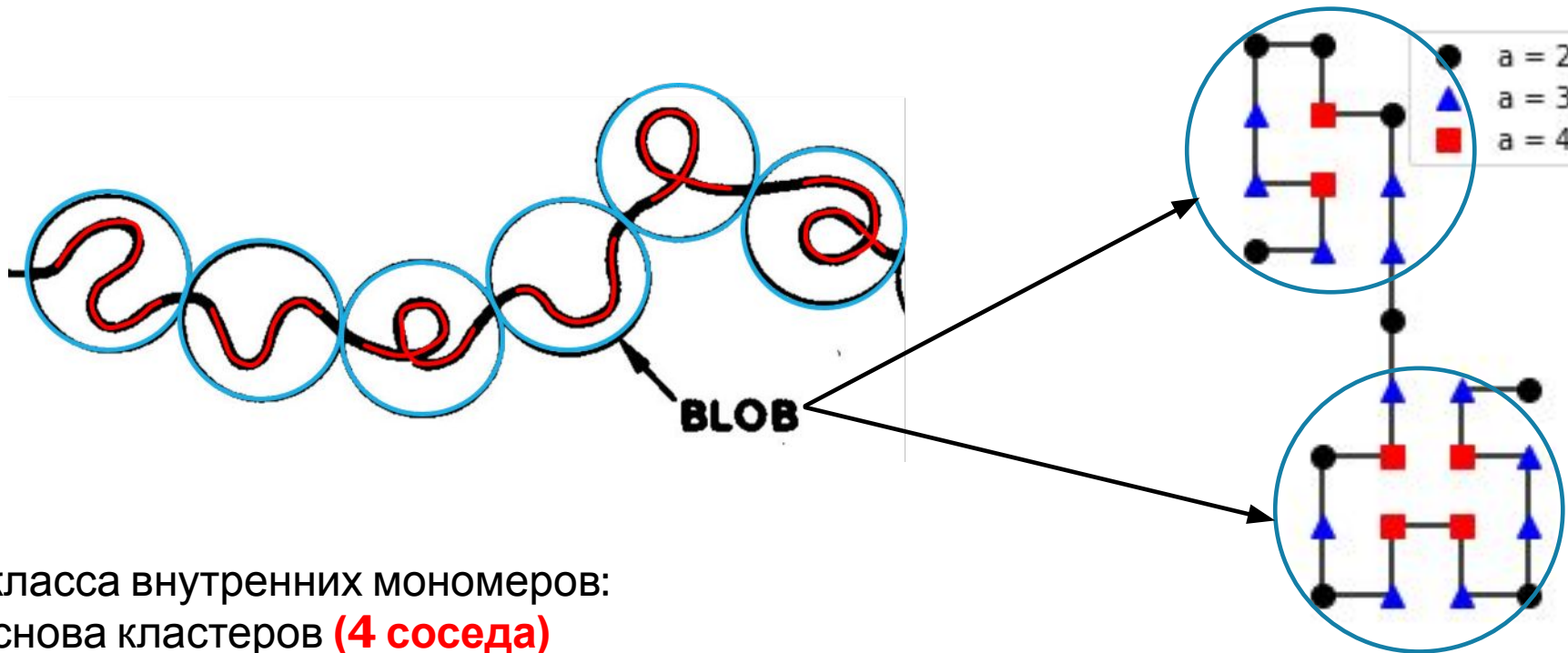
Исследуемые решётки:

- *Квадратная*
- *Треугольная*
- *Кубическая*
- *4D-Гиперкубическая*



Предельные геометрические состояния модели – фазовый переход “Клубок-Глобула”

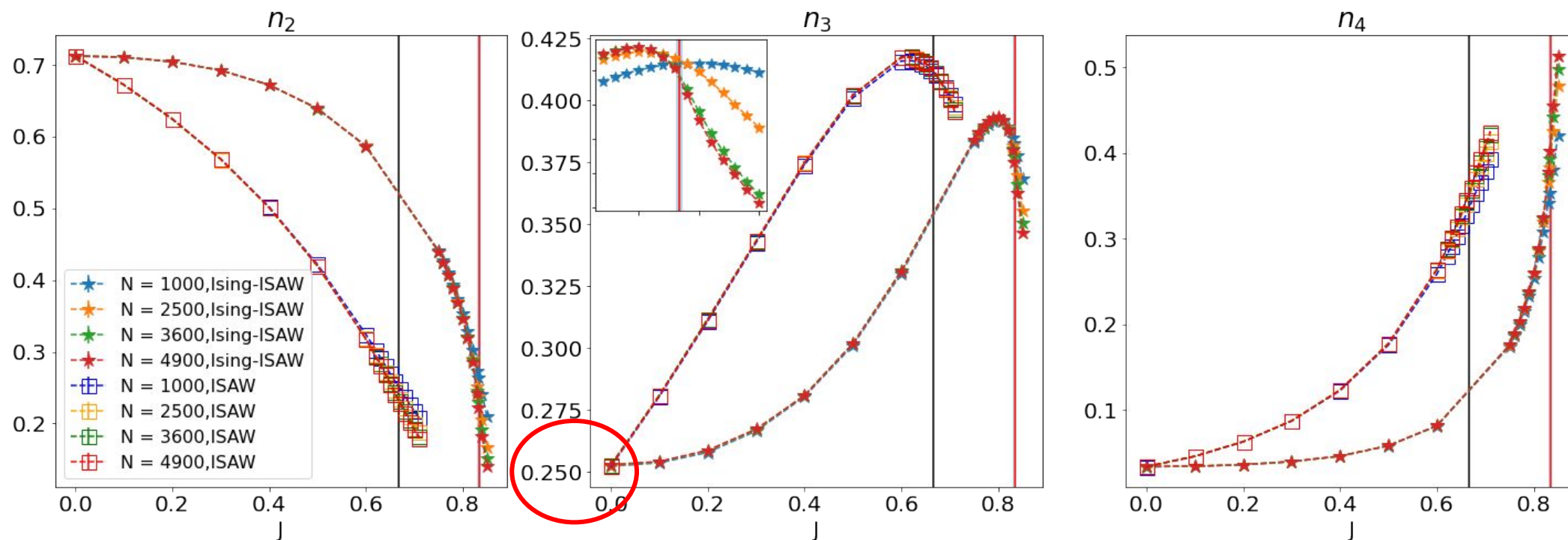
ЛОКАЛЬНОЕ КООРДИНАЦИОННОЕ ЧИСЛО МОДЕЛИ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЁТКЕ



Три класса внутренних мономеров:

- Основа кластеров (**4 соседа**)
- Границы кластеров (**3 соседа**)
- Одномерные цепочки между кластерами (**2 соседа**)

РАННИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛКЧ



Зависимость долей узлов с 2-4-мя соседями от J на квадратной решётке – взято из:

K. Faizullina, IP, E. Burovski Critical and geometric properties of magnetic polymers across the globule-coil transition //Phys. Rev. E **104**, 054501, 2021

1. Нетривиальное поведение доли поверхностных узлов
2. Шкалирование долей ЛКЧ при $J=0$



АТМОСФЕРЫ БЛУЖДЕНИЙ

- Изучалось на **невзаимодействующем блуждании без самопересечений** в:
A. Owczarek, T. Prellberg Scaling of the atmosphere of self-avoiding walks. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 41(37):375004, 2008
- Рассматривалась вероятность атмосферы K у сгенерированного блуждания
- Определен **линейный характер** шкалирования вер-сти относительно длины блуждания

Сходство/различие поведения внутренних и граничных узлов цепочки

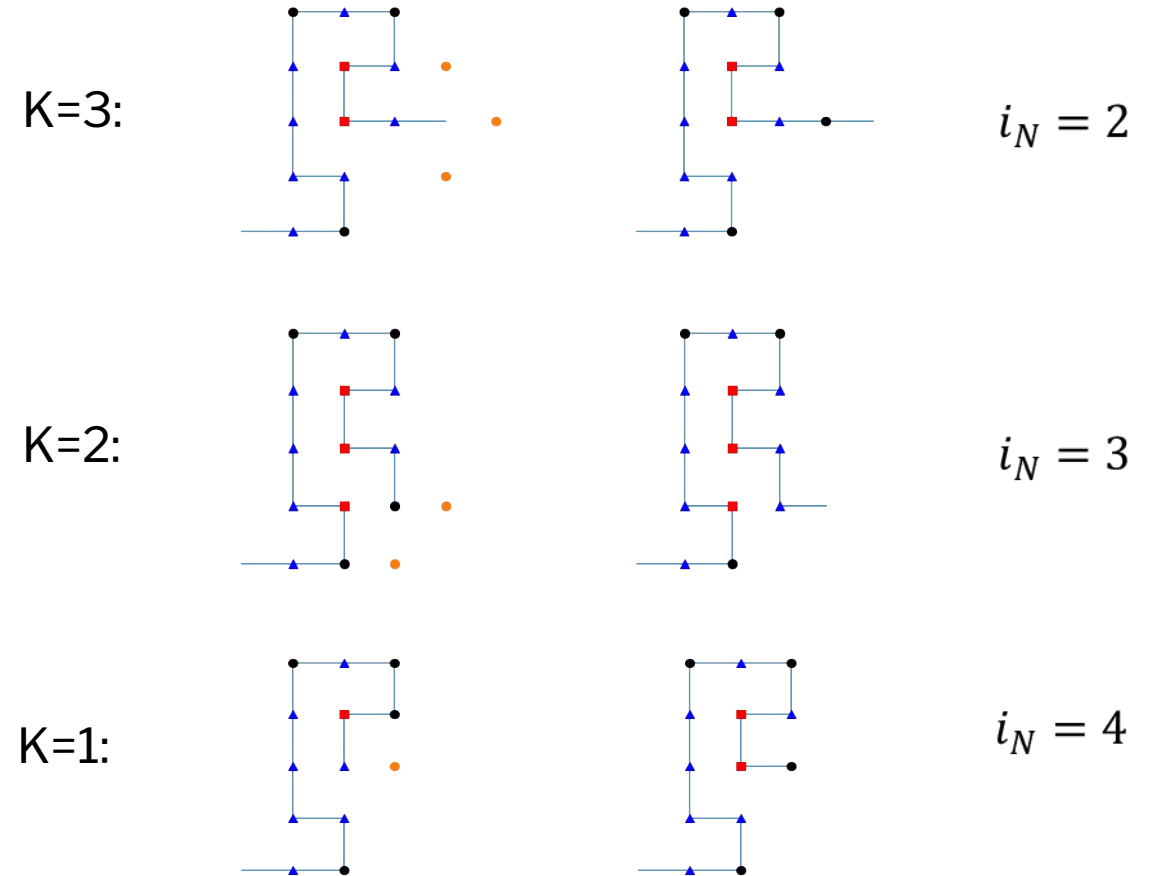
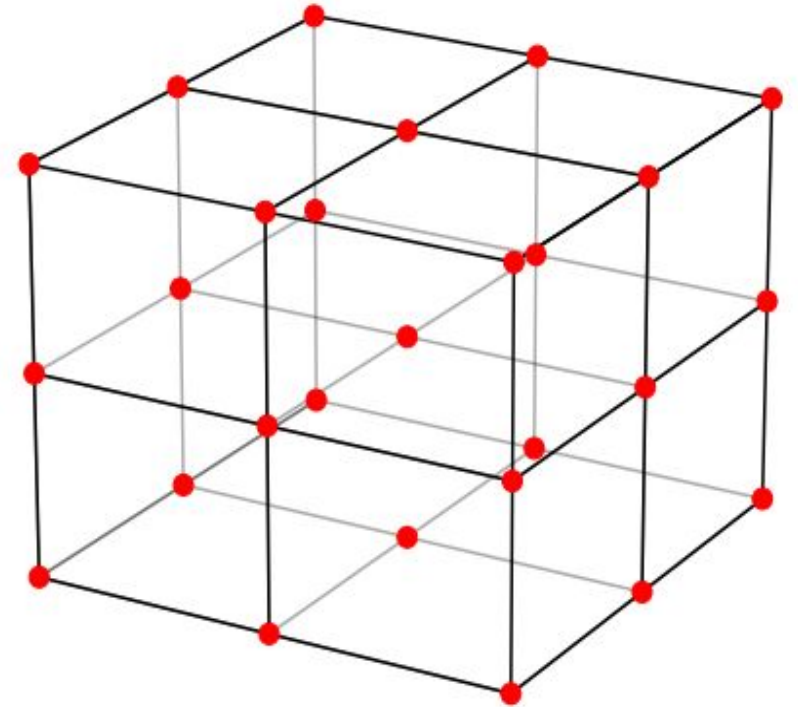
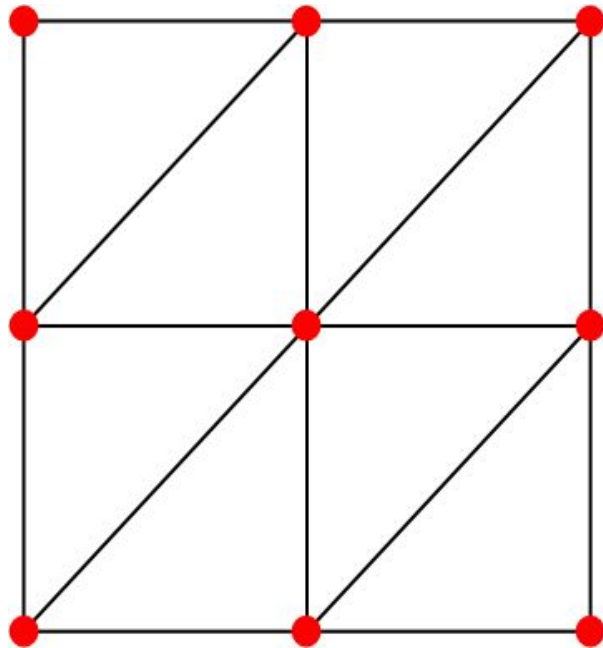
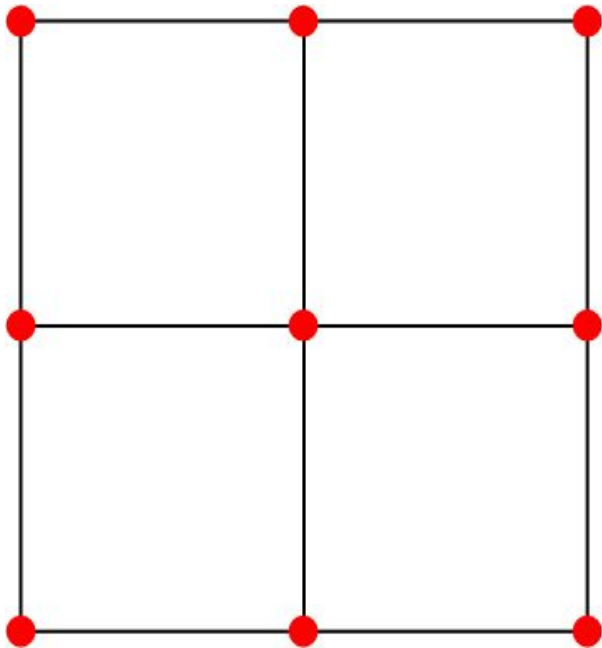
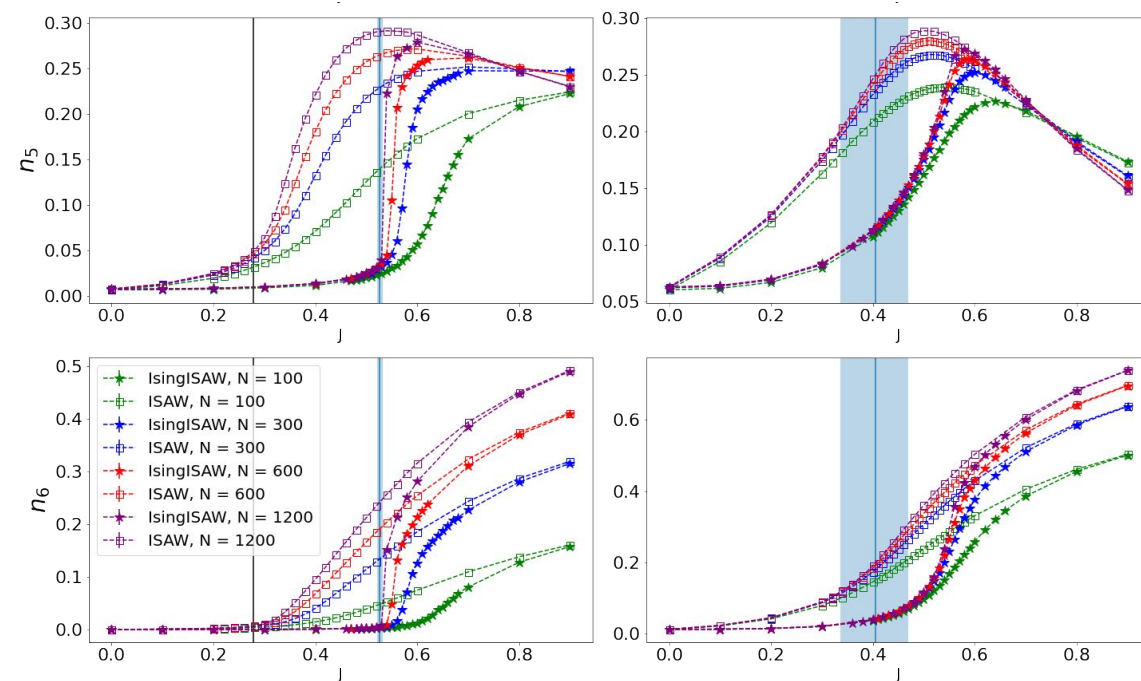
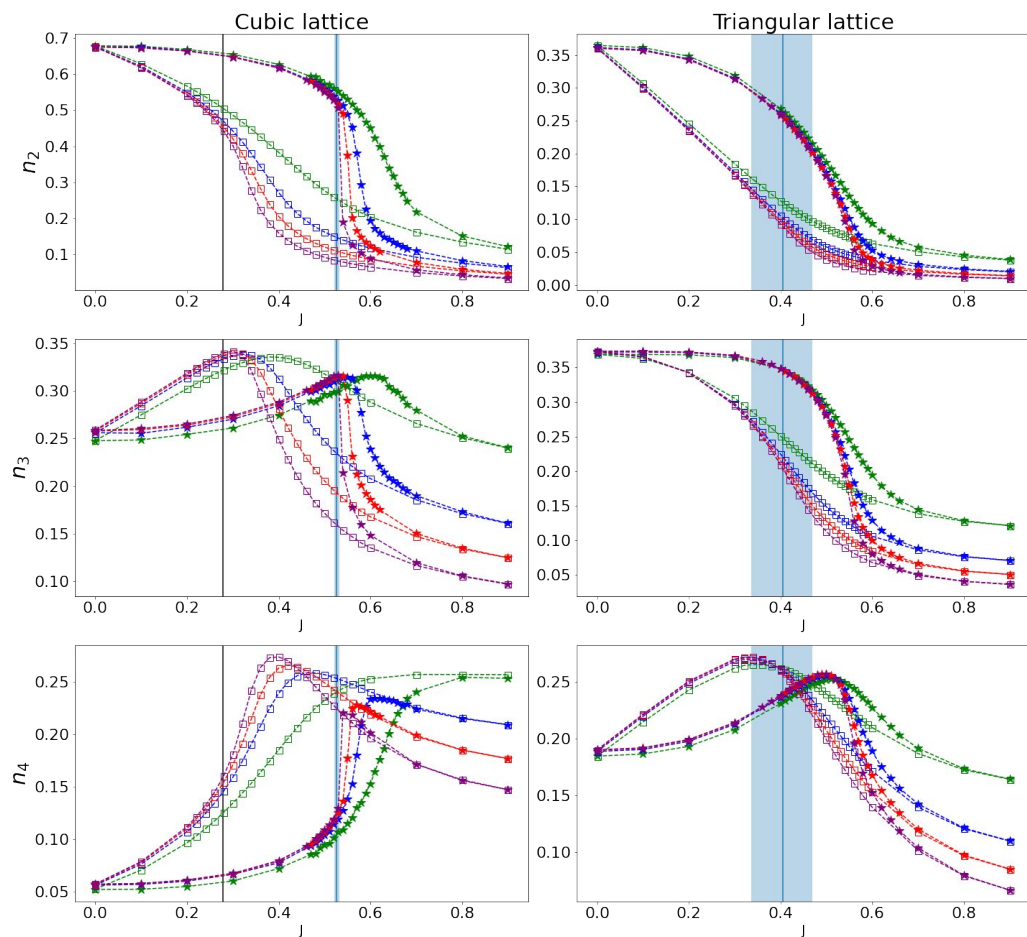


Схема предполагаемого перехода от свойства атмосферы блуждания длины N к числу соседей узлов блуждания длины $N+1$

ИССЛЕДУЕМЫЕ РЕШЁТКИ В $J=0$ – УНИВЕРСАЛЬНЫ ЛИ СВОЙСТВА?



СРАВНЕНИЕ ТРЕУГОЛЬНОЙ И КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТОК

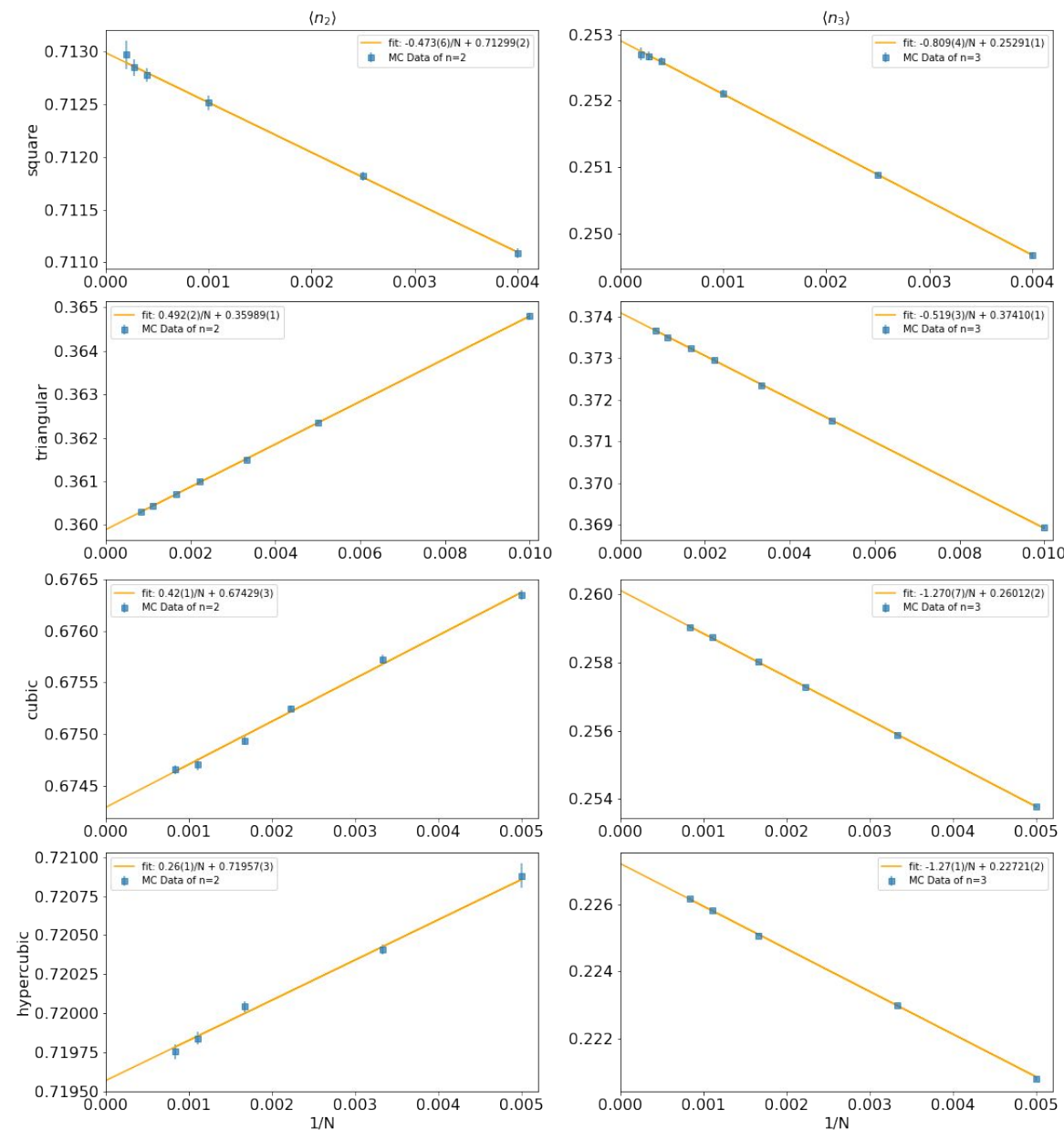


СЛУЧАЙ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ БЛУЖДЕНИЙ

- Определён **линейный** характер шкалирования долей ЛКЧ:

$$\langle n_i \rangle = a * (1/N) + b$$

	$\langle n_2 \rangle$	
Lattice	a	b
Square	-0.473(6)	0.71299(2)
Triangular	0.492(2)	0.35989(1)
Cubic	0.42(1)	0.67429(3)
Hypercubic	0.26(1)	0.71957(3)
	$\langle n_3 \rangle$	
Lattice	a	b
Square	-0.809(4)	0.25291(1)
Triangular	-0.519(3)	0.37410(1)
Cubic	-1.270(7)	0.26012(3)
Hypercubic	-1.27(1)	0.22721(2)

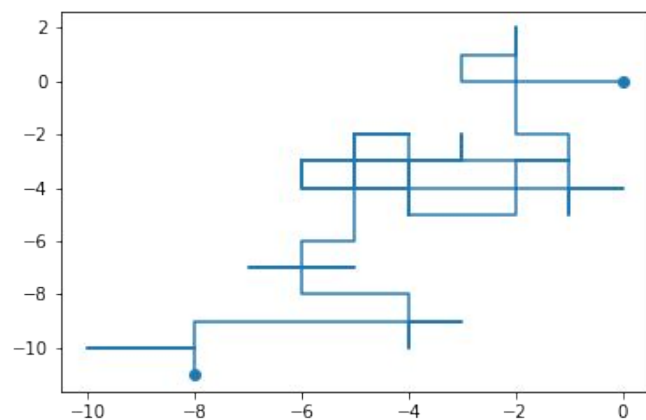


СРАВНЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ВНУТРЕННИХ И КРАЕВЫХ УЗЛОВ

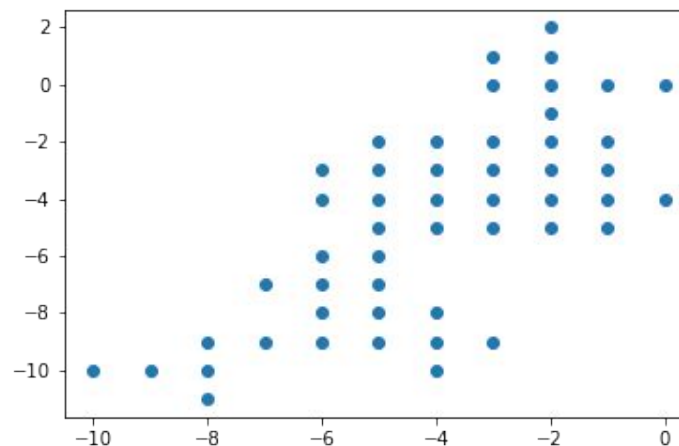
k	$p^{(k)}$	i	$b(\langle n_i \rangle)$
3	0.711 14(3)	2	0.71299(2)
2	0.225 00(2)	3	0.25291(1)
1	0.054 76(1)	4	0.03410(1)

- Свойства атмосфер блуждания и локального координационного числа внутренних узлов определяют разные аспекты геометрического поведения модели

ПРОСТОЕ СЛУЧАЙНОЕ БЛУЖДЕНИЕ (RW)



Сгенерированное блуждание
без эффектов исключенного объёма

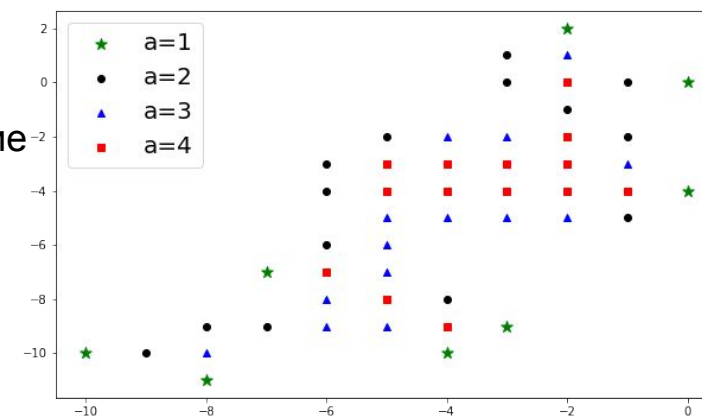


Набор уникальных узлов

Влияние эффектов
исключённого объёма
на поведение ЛКЧ и
атмосферы блуждания



Распределение
по числу
соседей



РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ $\langle n_i \rangle$

- **Степенной** характер шкалирования долей узлов, как от числа шагов блуждания, так и числа уникальных узлов
- Степенной закон шкалирования доли уникальных узлов RW
- Схожее численное поведение и равные пределы функций разных аргументов (в пределах ошибок метода аппроксимации)
- У функций от N_{unique} степенные коэффициенты соразмерно выше чем у функций от N

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

	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

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

	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

РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ $\langle p^{(k)} \rangle$

Аналогично долям узлов:

- Степенной характер шкалирования
- сходство по поведению
- равенство пределов в границах погрешностей
- большая информативность аргумента числа уникальных узлов по сравнению с числом шагов

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

	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

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

	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

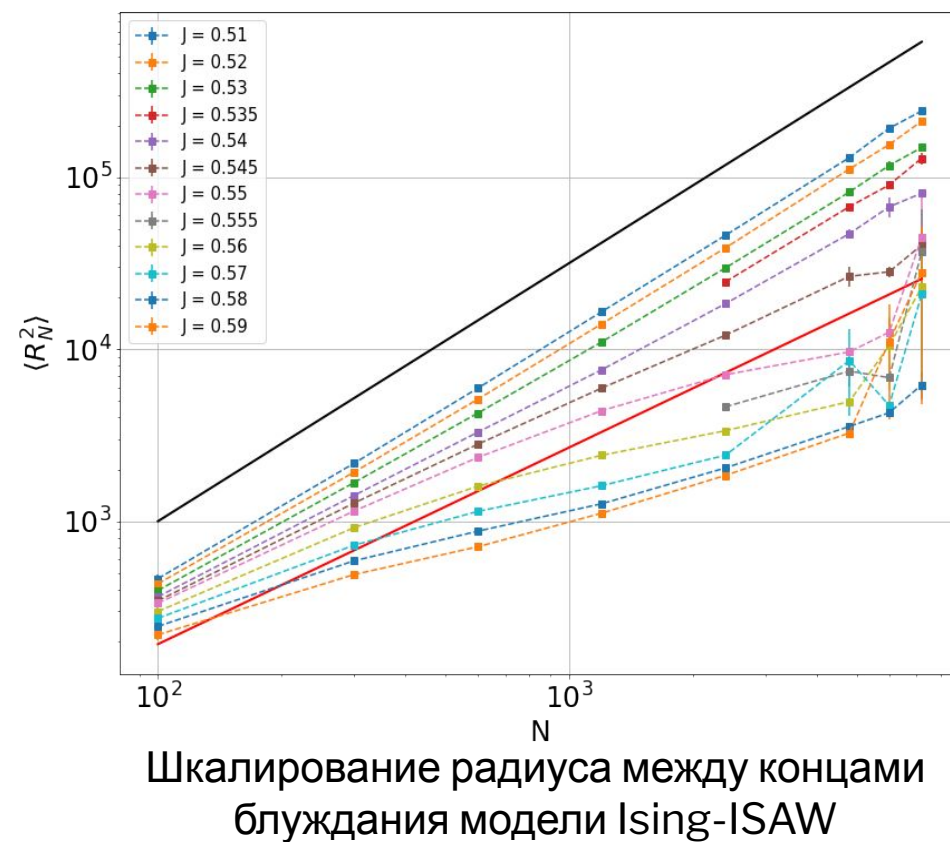
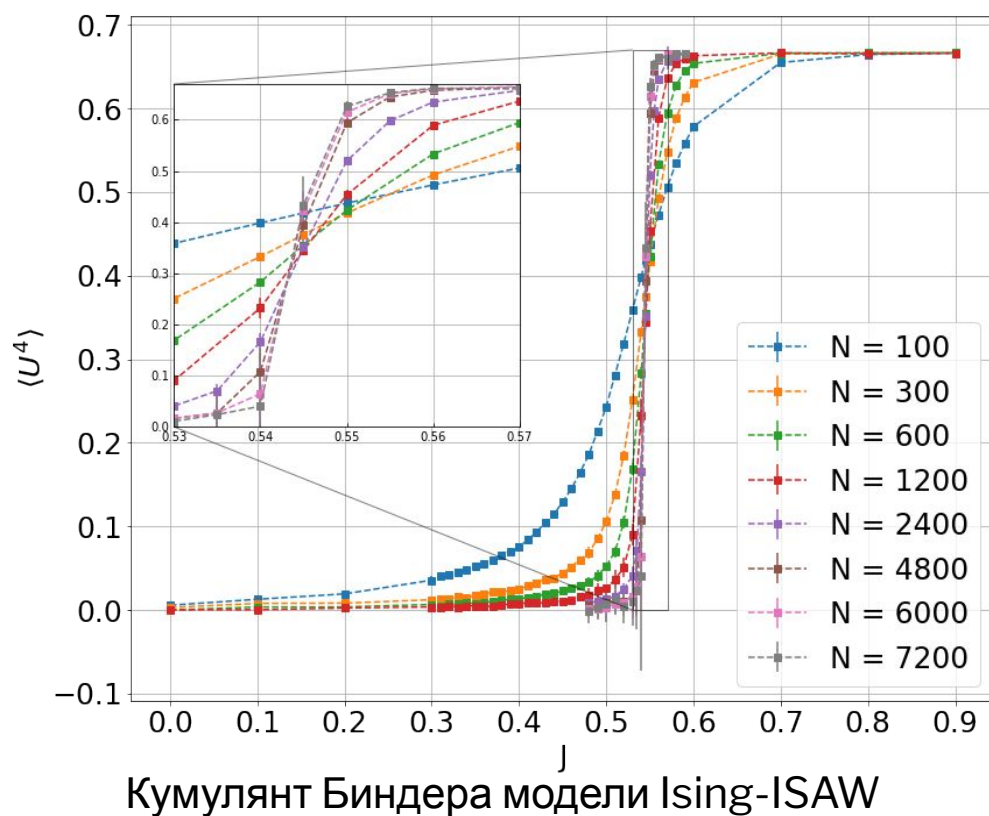
СРАВНЕНИЕ ВЕЛИЧИН ЛОКАЛЬНЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ ЧИСЕЛ

- Коэффициенты шкалирующих функций, а также пределы долей ЛКЧ и атмосфер блуждания отличаются значительно сильнее погрешностей
- Между величинами заметно лишь знаковое свойство линейных коэффициентов
- Поведение простого случайного блуждания так же отлично от дочерней SAW-модели.

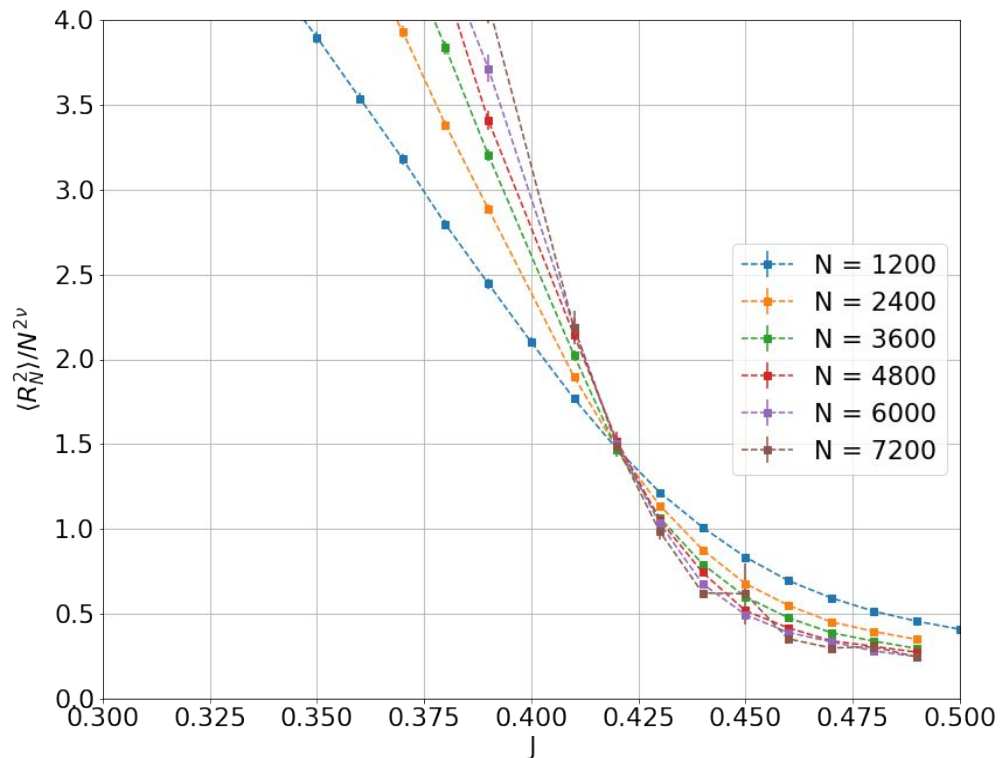
v	$d(n_v)$	$d(p^{(4-v)})$
1	0.015(1)	0.097(3)
2	0.053(2)	0.141(3)
3	0.203(2)	0.214(6)
4	0.741(5)	0.59(2)

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)



КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МОДЕЛЕЙ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЁТКЕ



ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ МОДЕЛЕЙ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЁТКЕ



Шкалирование радиуса между концами
блуждания модели ISAW

Модель	Ранние результаты		ВКР
			
ISAW	0.41(7)	0.6673(5)	0.42(1)
Ising-ISA W	-	0.8340(5)	0.545(5)

1. Оценки фазовых переходов треугольных моделей **отличаются** от квадратных
2. Критические экспоненты моделей оказались **идентичны** при разных решётках