

# Геометрические свойства модели Изинга на взаимодействующем блуждании без самопересечений

## Аннотация

В работе изучается модель Изинга на случайном блуждании без самопересечений на квадратной, треугольной, кубической и 4D-гиперкубической решётках, в сравнении с родительскими моделями взаимодействующего случайного блуждания без самопересечений и классической модели Изинга на прямоугольной решётке. С помощью метода Монте-Карло по алгоритму Червя и кластерному алгоритму Вольфа изучены геометрические и магнитные свойства, и проведено их сравнение с родительскими моделями и между модификациями изучаемой модели в аналогичных условиях.

## Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Модели и методы</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Средняя асферичность и критический кумулянт модели Ising-ISAW и прямоугольного Изинга</b>	<b>7</b>
3.1	Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга . . . . .	7
3.2	Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий . . . . .	8
3.3	Связь тензора инерции и тензора вращения . . . . .	10
3.4	Показатели формы блуждания из тензора вращения . . . . .	11
3.5	Асферичность прямоугольных решёток . . . . .	12
3.6	Свойства моделей вблизи фазового перехода с учётом показателей формы . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Геометрические свойства модели Ising-ISAW с точки зрения числа соседей в узлах</b>	<b>18</b>
4.1	Введение . . . . .	18
4.2	Особенности ранних результатов на квадратной решётке . . . . .	18
4.3	Сравнение модели Изинга и полимерной цепочки в решетках с 2-6 возможными соседями мономеров .	19
4.4	Алгоритм исследования характера зависимости значения долей узлов от длины при $J=0$ . . . . .	22
4.5	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на треугольной решётке с квадратной в $J=0$ . . . .	24
4.6	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на решётках с большим числом соседей в $J=0$ . . .	26
4.7	Число соседей в атмосферах Преллберга . . . . .	28



# 1 Введение

Модель случайных блужданий без самопересечений (далее - СБС) - одна из наиболее широко изученных моделей из класса линейных полимеров. Более того, она является одной из простейших моделей для изучения критического поведения - так, в случае когда модель усложнена наличием взаимодействия между ближайшими узлами цепочки, её фазовый переход оказывается зафиксирован между состояниями её растворителя, и при термическом равновесии системы полученная полимерная цепочка будет схлопнутой в условиях сильного растворителя или вытянутой в слабом растворителе. Трикритичность данного перехода была описана в работе [7].

Влияние близких связей было широко рассмотрено среди класса моделей магнитного полимера, взаимодействие между узлами которых стало ещё более сложным: каждый узел обладает спином, а сила взаимодействия между ближайшими узлами стала отдельным параметром. Её название - модель Изинга на случайном блуждании без самопересечений. В работе [10] был рассмотрен случай, когда она так же обладает переменным внешним полем, и все заключения о её магнитных свойствах были оценены в сравнении с моделью среднего поля. В то же время влияние геометрических свойств модели на магнитные не до конца ясно и их изучение в некоторых случаях требует статистического подхода.

В предыдущей работе [8] было определено, что фазовый переход двумерной модели Изинга на СБС имеет непрерывный характер. В этой работе мы продолжаем изучать геометрические свойства данной модели и сравнивать их с её родительскими моделями или модификациями, такими как классическая модель Изинга на регулярной решётке, определённая в работе [15], и взаимодействующее случайное блуждание без самопересечений в соответствующих критических областях. Мы предполагаем, что модели с похожими геометрическими свойствами будут так же иметь схожесть в магнитных, что мы рассмотрим при сравнении кумулянтов биндера в области  $\theta$ -перехода моделей при равных значениях асферичности. Также могут быть интересны для рассмотрения решётки, на которых исследуются конформации модели, как параметр задающий закон, по которому определяется существование связей между узлами в цепочке. Данное направление было начато в частном случае для концов случайных блужданий без самопересечений на квадратной решётке в работе [12]. В нашей работе мы рассмотрим эти результаты с долями узлов с фиксированным количеством соседей на квадратной решётке, как обобщение на внутренние узлы цепочки, а так же рассмотрим поведение данного геометрического свойства среди разных решёток в пределе бесконечной длины цепочки.

## 2 Модели и методы

В рамках данной работы определяется несколько моделей: первой будет модель Изинга на случайном блуждании без самопересечений (далее - Ising-ISAW). Энергия системы конформации  $u$  (последовательности точек на решётке, на которых размещена цепочка) фиксированной длины  $N$  с последовательностью спинов в узлах  $s$ , принимающих значение  $+1$  или  $-1$ , рассчитывается как сумма взаимодействий между ближайшими узлами цепочки:

$$E(s, u) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j, \quad i, j \in u, |u| = N \quad (2.1)$$

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

$$Z = \sum_s \sum_u \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \quad (2.2)$$

где  $T$  — температура,  $k$  — постоянная Больцмана. Без потери общности можно считать  $kT = 1$ , тем самым оставляя  $J$  самостоятельным параметром модели. В первой части работы модель Ising-ISAW рассматривается только на квадратной решётке, где соседями узла можно считать мономеры, расположенные сверху, снизу, слева и справа от него.

Первая часть работы посвящена сравнению Ising-ISAW с ”родительских” по отношению к ней моделей. С одной стороны, взаимодействующая составляющая модели берётся из классических моделей Изинга - в частности, мы будем рассматривать классическую модель Изинга на регулярной прямоугольной решётке (далее - прямоугольный Изинг), определенную так же в работе [15]. В ней узлы со спинами заполняют всю решётку со стороной  $L = N_x$  и отношением сторон  $r = \frac{N_y}{N_x}$ . Длина стороны считается как количество узлов решётки в одном ряде. Решётка может иметь как периодические граничные условия - когда узлы на противоположных краях решётки считаются соседними - так Тогда энергия системы с последовательностью спинов  $s$ , рассчитывается как сумма взаимодействий между ближайшими узлами по всей решётке:

$$E(L, r, \{s\}) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j, \quad i, j = (x_i, u_i), (x_j, y_j) \in [1..L] \times [1..L * r] \quad (2.3)$$

Статическая сумма модели берётся только возможным последовательностям  $s$ :

$$Z = \sum_s \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \quad (2.4)$$

В качестве сравниваемого между моделями магнитного свойства определим кумулянт Биндера (или критический кумулянт):

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3(m^2)^2} \quad (2.5)$$

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

С другой стороны, определим модель взаимодействующего блуждания без самопересечений (далее - ISAW) на квадратной решётке из работы [6]. В отличие от Ising-ISAW, узлы конформации не имеют спинов, и энергия модели рассчитывается как сумма связей переменной силы  $J$  между узлами:

$$E(\{u\}) = \sum_{\langle i, j \rangle} 1, \quad i, j \in u, |u| = N \quad (2.6)$$

$$Z = \sum_s \exp(-\beta E(\{s\})) \quad (2.7)$$

В рамках работы [6] исследовалось поведение геометрических свойств в критической области - в частности, асферичности конформации, показателя отличия системы узлов от круга. Для этого определим показатели формы системы, такие как тензор вращения системы - матрица корреляции координат системы из  $N$  точек  $w_i = (w_{i,\alpha}, w_{i,\beta})$ :

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{k,\beta}) \quad (2.8)$$

Собственные значения  $q_1, q_2$  полученного тензора вращения можно интерпретировать как квадраты длин полуосей эллипса вращения системы. Их отношение для системы длины  $N$  равно:

$$r = \sqrt{\frac{\langle q_1 \rangle_N}{\langle q_2 \rangle_N}} \quad (2.9)$$

Так же эти значения используются для расчёта ещё одного показателя формы - средней асферичности:

$$\mathcal{A} = \left\langle \frac{(q_1 - q_2)^2}{(q_1 + q_2)^2} \right\rangle_N \quad (2.10)$$

В рамках второй части работы будут рассмотрены модификации исследуемой системы Ising-ISAW, имеющие изменения в выбранной решётке, законами которой определяется "близость узлов" цепочки и координационное число - максимально возможное количество связей с одним узлом цепочки или максимальное число соседей у узла решётки: в квадратной решётке 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  $\pm 1$  от рассматриваемого узла.

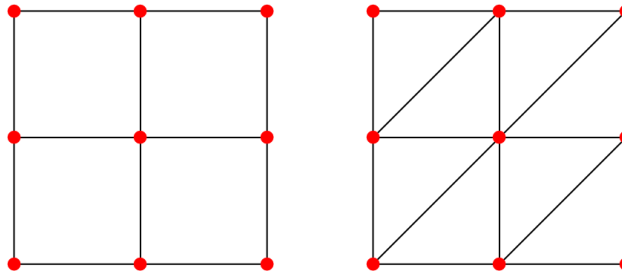


Рис. 1: Связи узлов в квадратной (слева) и треугольной решётках (справа)

Между моделями будет проведено сравнение локального координационного числа - средней доли узлов с фиксированным числом соседей  $\langle n_i \rangle$ , рассчитываемое напрямую как среднее по возможным конформациям отношение мономеров с  $i$  соседями к общему количеству узлов в цепочке.

В обеих частях работы нас интересует сравнение поведения описанных моделей в критической области. В таблицах 1 и 2

Для симуляции моделей в нескольких степенях свобод применяются методы Монте-Карло. Исследуемая модель Ising-ISAW уже рассматривалась ранее в работах [10, 13] 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 этого используется алгоритм на основе метода Червя (для генерации

Структура	Решётка	$J_c$
конформация СБС	Квадратная	0.8340(5) [8]
конформация СБС	3D-кубическая	$0.5263 \pm 0.055$ [9]
регулярная решётка	Прямоугольная	$\ln(1 + \sqrt{2})/2$ [11]

Таблица 1: Известные значения критической точки  $J_c$  некоторых модификаций модели Ising-ISAW и прямоугольного Изинга

Решётка	$\beta_c$
Квадратная	0.6673(5) [6]
3D-кубическая	$0.2779 \pm 0.0041$ [16]
Треугольная	$0.405 \pm 0.07$ [14]

Таблица 2: Известные значения критической точки  $\beta_c$  некоторых модификаций модели ISAW

движущихся конформаций), и кластерного алгоритма Вольфа. Для генераций родительских моделей оба метода применяются по отдельности. Полное описание используемого метода моделирования описаны в работе [8].

### 3 Средняя асферичность и критический кумулянт модели Ising-ISAW и прямоугольного Изинга

#### 3.1 Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга

Кумулянт Биндера для модели Изинга в критической точке рассчитывается по формуле 2.5

Для сравнения значения кумулянтов модели прямоугольного Изинга с разными размерами, но одинаковым отношением сторон (так же Aspect Ratio или  $r$ ), так, что число спинов составляет  $L \times rL$  были проведены симуляции модели на основе алгоритма из проектной работы [3] - для этого были взяты длины  $L = 50, 100, 200$  и  $400$  и отношения сторон  $r = 1/4, 1/2, 3/4$  при  $2 \times 10^6$  итераций. Все расчёты проводились в критической точке [15]:

$$J = \frac{1}{2.26918...} \quad (3.1)$$

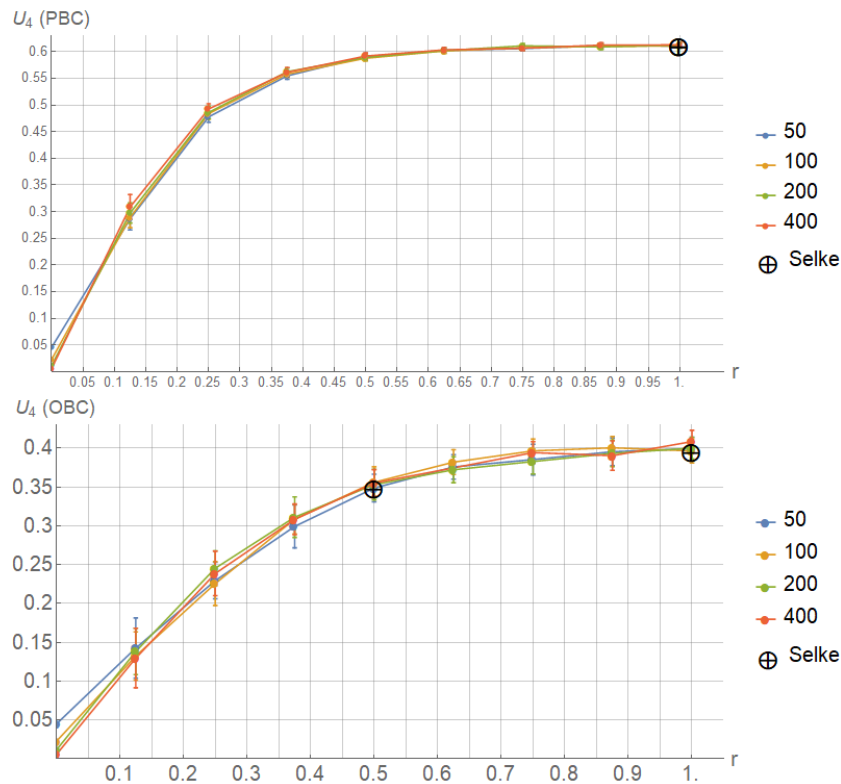


Рис. 2: График зависимости значения кумулянта Биндера (2.5) в крит. точке (3.1) от Aspect Ratio при открытых (снизу) и периодических гран. условиях (сверху). Черные точки - значения критических кумулянтов из работы W. Selke [15]

Крайние левые точки в отметке нуля являются расчётами для модели одномерного Изинга (где длина цепочки равна соответствующей стороне в двумерном изинге). Так, в случае открытых гран. условий (рис. 2 снизу) и периодических (рис. 2 сверху) значения кумулянта стремится к нулю с увеличением длины цепочки [1]. Черными точками отмечены значения критического кумулянта из работы [15]:

Эти же значения отмечены в графиках 3 и 4 зависимости крит. кумулянта от обратной длины стороны как крайние левые (в нуле - так обозначен случай термодинамического предела).

Boundary	r	$U_4$
OBC	1	$0.396 \pm 0.002$
OBC	0.5	$0.349 \pm 0.002$
PBC	1	0.61069...

Таблица 3: Таблица значений критических кумулянтов для прямоугольных решёток из статьи У. Сельке [15]

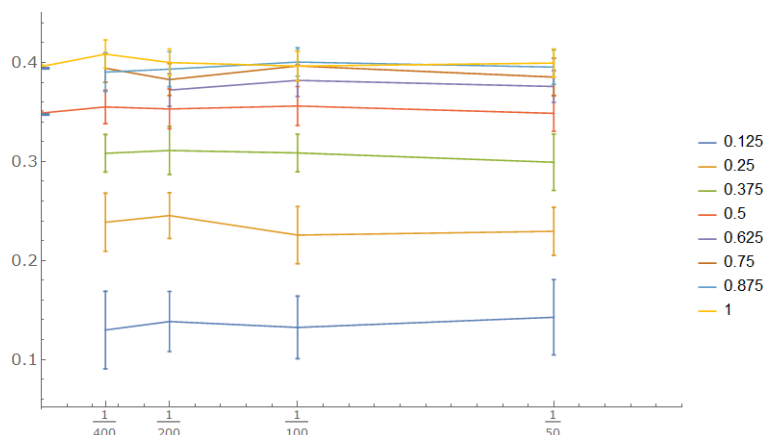


Рис. 3: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при открытых гран. условиях

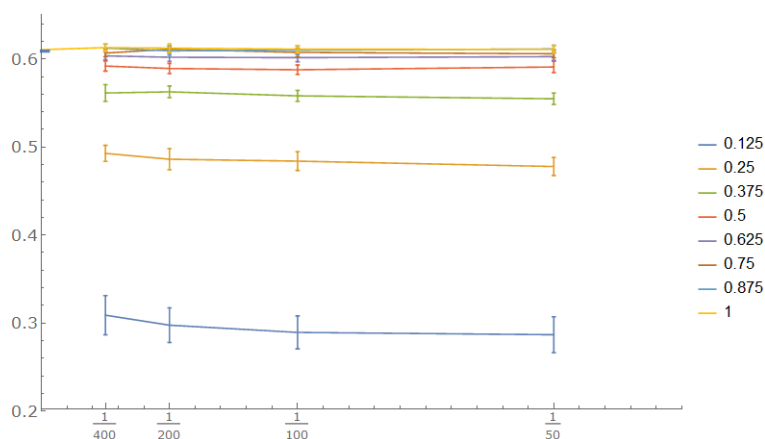


Рис. 4: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при периодических гран. условиях

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

### 3.2 Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий

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



Важнейшим параметром в описании полученной симуляциями Монте-Карло блуждания из  $N$  узлов является радиус инерции, численно равный среднему квадратическому расстоянию частиц ( $i$ -я частица в блуждании имеет вектор  $w_i$ ) от положения среднего арифметического центра системы (сумма  $w_k$  в скобке) [6]:

$$R_g^2 = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left( w_i - \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_k \right)^2 = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^N (w_i - w_j)^2 \quad (3.2)$$

(Под операцией возведения вектора или разности векторов в квадрат подразумевается сумма квадратов элементов вектора) Так же для описания формы модели применяется тензор вращения относительно центра масс - матрица,  $\alpha\beta$ -й элемент которой рассчитывается по формуле (4) из статьи [5] :

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{c,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{c,\beta}) \quad (3.3)$$

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

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{(N+1)} \sum_{i=0}^N w_{i,\alpha} w_{i,\beta} \quad (3.4)$$

$$\sum_{i=0}^N w_i = 0 \quad (3.5)$$

Рассмотрим формулу (3.3). Так как  $w_c$  - центра масс блуждания, то:

$$w_c = \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_k \quad (3.6)$$

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

$$w_i = \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_i \quad (3.7)$$

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

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

Расскроем суммирование у учётов зависимостей индексов:

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

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

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

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{k,\beta}) \quad (3.8)$$

совпадает с формулой (4.1) из статьи о взаимодействующих блужданиях [6], что значит что используемое ими понятие ”тензора вращения” совпадает.

### 3.3 Связь тензора инерции и тензора вращения

Можно заметить некоторое сходство в расчётах недиагональных элементов тензора инерции  $J$  и тензора вращения из статей [5,6]. Действительно, для системы из  $N$  материальных точек единичной массы тензор инерции в системе центра масс рассчитывается следующим образом:

$$J = \begin{pmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$J_{xy} = J_{yx} = - \sum_{i=1}^N x_i y_i \quad (3.10)$$

$$J_{yz} = J_{zy} = - \sum_{i=1}^N y_i z_i \quad (3.11)$$

$$J_{xz} = J_{zx} = - \sum_{i=1}^N x_i z_i \quad (3.12)$$

В тоже время, формулы диагональных элементов принципиально отличаются:

$$J_{xx} = \sum_{i=1}^N y_i^2 + z_i^2 \quad (3.13)$$

$$J_{yy} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + z_i^2 \quad (3.14)$$

$$J_{zz} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 \quad (3.15)$$

Сравнивая с формулой элементов тензора вращения в системе центра масс (3.4), можно заметить, что недиагональные элементы тензоров отличаются знаком и усреднением в тензоре вращения. Диагональные же элементы

”противоположны” друг другу: в тензоре инерции они обозначают осевые моменты инерции (относительно  $O_\alpha$ , и поэтому обозначенные моменты одной координатой ( $J_{\alpha\alpha}$  используют сумму квадратов отличных от  $\alpha$  координат).

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

$$Q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{i,\alpha}^2 = \frac{1}{N} \left( \sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - J_{\alpha\alpha} \right) = R_g^2 - \frac{1}{N} J_{\alpha\alpha} \quad (3.16)$$

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

$$Q_{\alpha\beta} = -\frac{1}{N} J_{\alpha\beta}, \quad \alpha \neq \beta \quad (3.17)$$

Тогда матричный вид формулы тензора вращения (3.4) через тензор инерции (3.9) будет:

$$Q = R_g^2 * E - \frac{1}{N} J \quad (3.18)$$

где  $E$  - это единичная матрица порядка, совпадающим с размерностью данной модели  $\text{Dim}$ .

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

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

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

$$S^T Q S = R_g^2 * E - \frac{1}{N} * J_D \quad (3.19)$$

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

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

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

### 3.4 Показатели формы блуждания из тензора вращения

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

В нашем двумерном случае,

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

Отметим так же, что сумма диагональных элементов тензора вращения равна квадрату радиуса вращения и инвариантна. Определим ещё один показатель формы из статьи [6]:

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

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

Так же из статьи [6] определим среднюю асферичность (показатель, насколько блуждание отличается от круга):

$$\mathcal{A} = \left\langle \frac{(q_1 - q_2)^2}{(q_1 + q_2)^2} \right\rangle_N \quad (3.20)$$

### 3.5 Асферичность прямоугольных решёток

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

Центр эллипса инерции совпадает с центром прямоугольной решётки, полуоси лежат вдоль сторон и их длины равны:

$$i_x = \sqrt{\frac{J_{xx}}{N}} \quad (3.21)$$

$$i_y = \sqrt{\frac{J_{yy}}{N}} \quad (3.22)$$

Здесь необходимо подчеркнуть, что моменты инерции считаются относительно осей в базисе, в которой тензор инерции обращается в диагональную матрицу. При этом нужно отметить, что  $i_x$  - длина полуоси, перпендикулярной оси  $OX$ , и наоборот,  $i_y$  - длина полуоси, перпендикулярной оси  $OY$  того же базиса. Поэтому для упрощения следующих расчётов мы сразу будем считать, что центр прямоугольника лежит в начале координат, а стороны параллельны осям координат - при таких условиях недиагональные элементы тензора инерции обращаются в ноль.

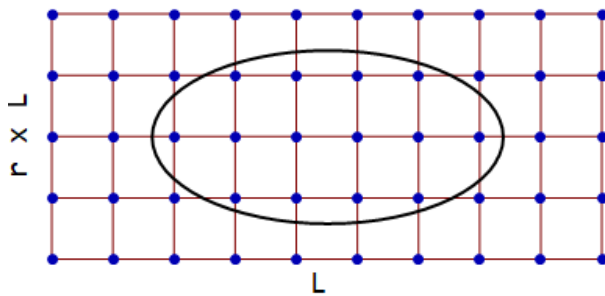


Рис. 5: Пример прямоугольной решётки со стороной  $L = 10$  и отношением сторон  $r = 0.5$  и её эллипс инерции, полуоси которого рассчитаны по формулам (3.21) и (3.22)

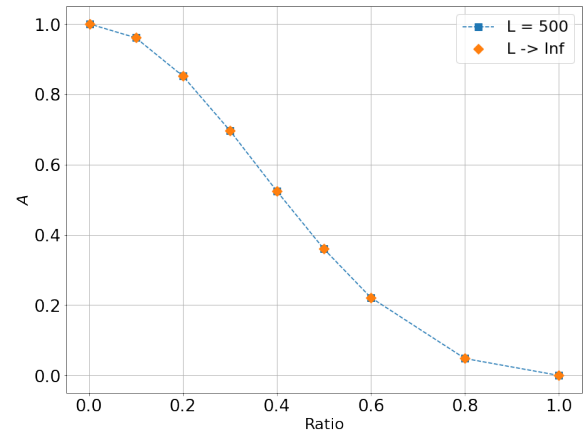


Рис. 6: График зависимости значения асферичности прямоугольной решётки длины 500 и в случае бесконечно большой длины от отношения сторон Ratio (или  $r$ )

L	r	$\mathcal{A}$
10	0.5	0.371802
100		0.360115
1000		0.360001
500	1.0	0
	0.8	0.048186
	0.6	0.221455
	0.5	0.360004
	0.4	0.524383
	0.3	0.697005
	0.2	0.852084
	0.1	0.960803
	0.002 (1D)	1

Таблица 4: Таблица зависимости значения асферичности прямоугольной решётки от стороны  $L$  и отношения сторон  $r$ . Значения для длины 500 соответствуют значениям из графика 6

r	$\mathcal{A}$
1.0	0
0.8	0.0481856
0.6	0.221453
0.5	0.36
0.4	0.524374
0.3	0.696995
0.2	0.852071
0.1	0.960788
0(1D)	1

Таблица 5: Таблица зависимости значения асферичности прямоугольной решётки бесконечно большой длины стороны  $L$  от отношения сторон  $r$ , отмеченная оранжевыми точками в графике 6 и рассчитанные по формуле (3.25)

Рассмотрим зависимость получаемой асферичности прямоугольной решётки с нефиксированными отношением сторон  $r$  и стороной  $L$ , чтобы оценить шкалирование данной величины от  $L$ , заметное из таблицы 5. Для начала рассчитаем собственные значения тензора вращения.

В случае, когда сторона прямоугольной решётки четна (то есть, имеет чётное количество узлов), решётка

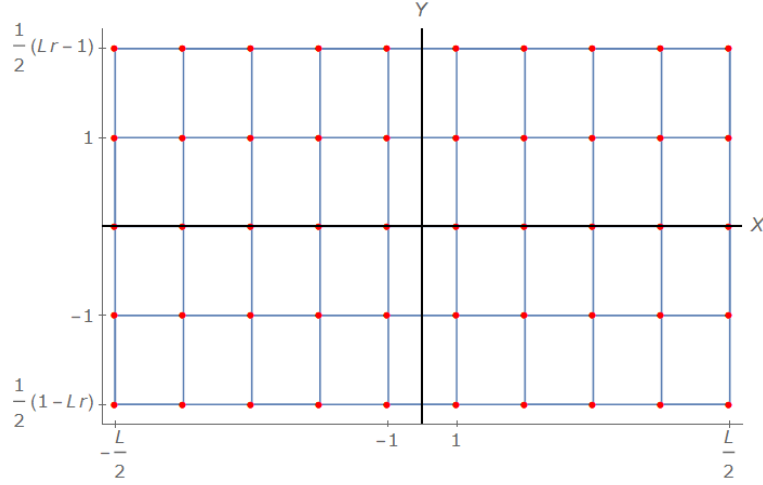


Рис. 7: Модель прямоугольной решётки для расчётов асферичности - она имеет четную и нечетную стороны, чтобы можно было рассмотреть всевозможные случаи

будет иметь по  $L/2$  спинов слева и справа от начала координат. Причем координаты узлов решётки будут иметь  $L/2$  различных по модулю значений абсциссы, повторяющихся  $rL$  раз. Тогда из (3.4), где  $N = L \times (r \times L)$ :

$$\begin{aligned}
 q_{xx} &= \frac{(r \times L) \sum_{i=1}^{L/2} 2(i-0.5)^2}{(r \times L)L} = \frac{\sum_{i=1}^{L/2} (2i^2 - 2i - 0.5)}{L} = \\
 &= \frac{0.5L/2}{L} - 2 \frac{1+2+\dots+L/2}{L} + 2 \frac{1+4+\dots+L^2/4}{L} = \\
 &= \frac{1}{4} - \frac{2}{L} \frac{L/2(L/2+1)}{2} + \frac{2}{L} \frac{L/2(L/2+1)(L+1)}{6} = \\
 &= \frac{1}{4} - \frac{L}{4} - \frac{1}{2} + \frac{L^2}{12} + \frac{3L}{12} + \frac{1}{6} = \frac{L^2 - 1}{12}
 \end{aligned}$$

Если же сторона прямоугольника нечётна, то один ряд будет лежать на оси и не будет участвовать в расчётах  $q$  для соответствующей оси (в случае из рисунка 7 -  $q_{yy}$  из (3.4)):

$$\begin{aligned}
 q_{yy} &= \frac{2L \sum_{i=1}^{(rL-1)/2} i^2}{(r \times L) \times L} = \frac{2}{rL} (1+4+\dots+(rL-1)^2/4) = \\
 &= \frac{2}{rL} \frac{(rL-1)/2 \times (rL+1)/2 \times rL}{6} = \frac{(rL)^2 - 1}{12}
 \end{aligned}$$

Из этого следует, что чётность сторон не влияет на собственные значения тензора вращения и для прямоугольников они равны:

$$q_{xx} = \frac{L^2 - 1}{12} \quad (3.23)$$

$$q_{yy} = \frac{(rL)^2 - 1}{12} \quad (3.24)$$

Перейдём непосредственно к расчёту асферичности по определению (3.20):

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} &= \frac{(q_1 - q_2)^2}{(q_1 + q_2)^2}, q_1 \geq q_2 \Rightarrow [q_1 = q_{xx}, q_2 = q_{yy}] \\
\mathcal{A} &= \left( \frac{L^2 - (rL)^2}{L^2 + (rL)^2 - 1/6} \right)^2 = \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2 - 1/(6L^2)} \right)^2 = \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} + \right)^2 = \\
&= \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} + \frac{1 - r^2}{6L^2(1 - r^2)^2} + O\left[\frac{1}{L^4}\right] \right)^2 = \\
&= \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} \right)^2 + \left( \frac{1 - r^2}{6L^2(1 + r^2)^2} \right)^2 + \frac{1 - r^2}{3L^2(1 + r^2)^3} + O\left[\frac{1}{L^4}\right] = \\
&= \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} \right)^2 + O\left[\frac{1}{L^2}\right]
\end{aligned}$$

В итоге, получаем:

$$\mathcal{A} = \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} \right)^2 + O\left[\frac{1}{L^2}\right] \quad (3.25)$$

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

Цель данного раздела - сравнить кумулянты Биндера в области фазового перехода у трёх моделей - ISAW, модель Изинга на полимерной цепочке Ising-ISAW и прямоугольный Изинг. В отличие от первых двух моделей, отношение сторон прямоугольного Изинга является параметром модели, а не наблюдаемой величиной. Следовательно, цель - сравнить крит. кумулянты моделей с прямоугольным Изингом, имеющим те же показатели формы, что имеют ISAW и Ising-ISAW в области фазового перехода. Для этого для первых двух моделей была рассчитана зависимость значения асферичности  $\mathcal{A}$  (3.20) от константы взаимодействия  $J$  при длиннах  $N = 1000, 2500, 3600, 4900$ .

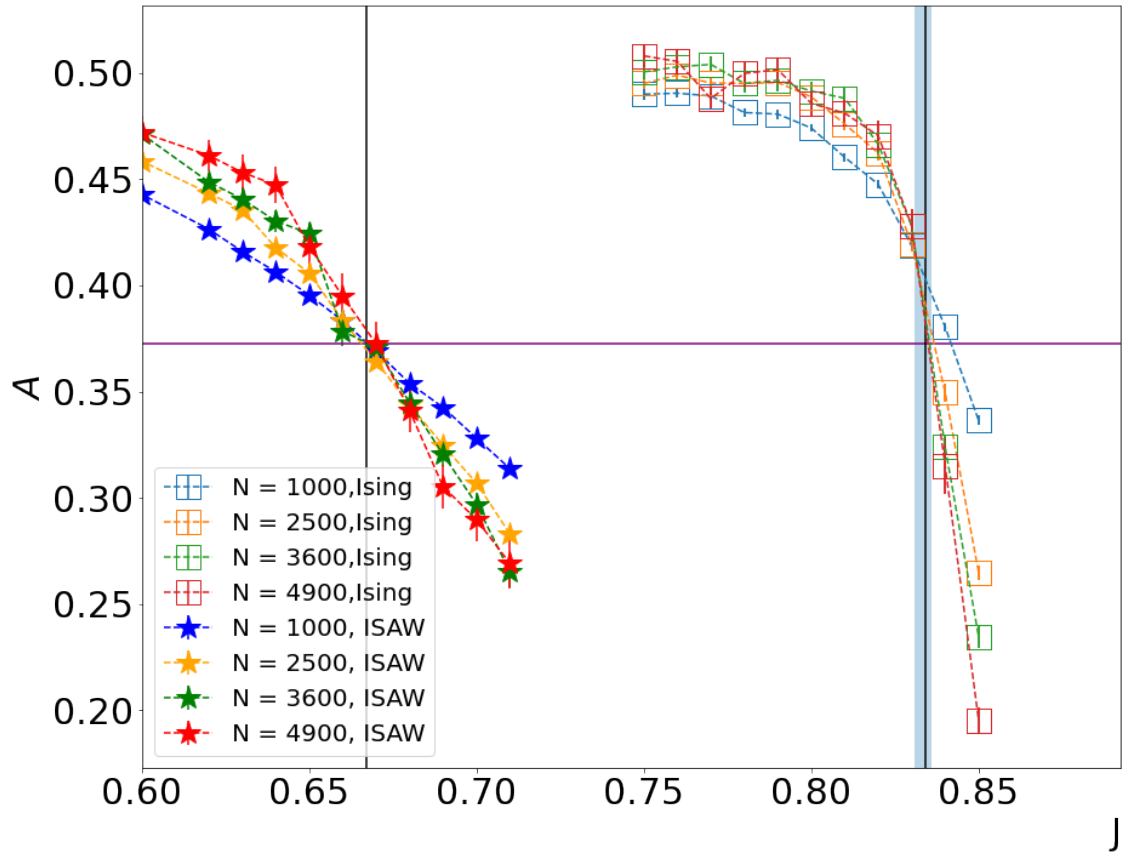


Рис. 8: График зависимости значения асферичности от константы взаимодействия для моделей взаимодействующего блуждания (слева) и Изинга на полимерной цепочке (справа)

Вертикальными линиями обозначены точки фазового перехода моделей: красными линиями отмечены граничные с точки зрения погрешности точки перехода в модели Изинга на гомополимерной цепочке ( $0.833 \pm 0.003$ , или  $T_c = 1/J_c = 1.199 \pm 0.003$  [9]), а черной сплошной - у модели ISAW ( $\approx 0.667$  [6]). Горизонтальной линией отмечено значение асферичности в критической области модели ISAW из статьи ((4.10) [6]), равное  $0.3726(7)$ . Однако перед тем как найти значение кумулянта для модели прямоугольного Изинга, необходимо подобрать такое отношение сторон, чтобы асферичность полученного прямоугольника совпадала со значением асферичности в точках перехода соответствующих моделей.



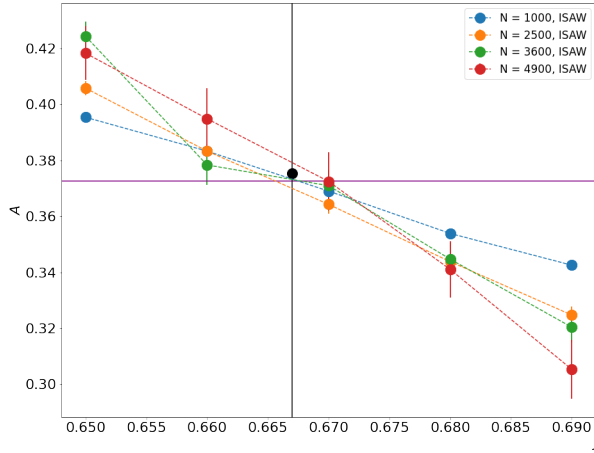


Рис. 9: График 8, увеличенный в масштабе в области фазового перехода модели взаимодействующих блужданий

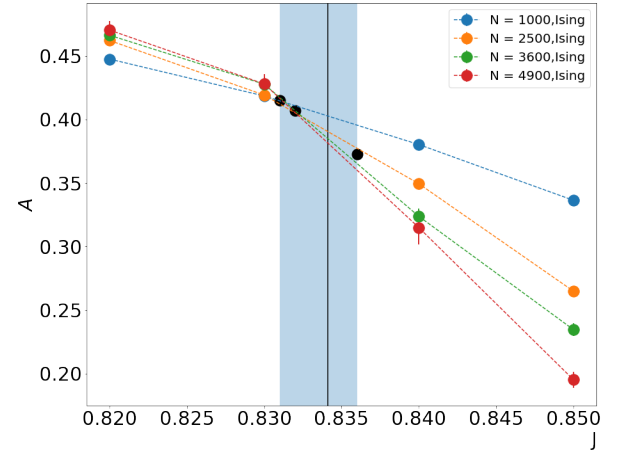


Рис. 10: График 8, увеличенный в масштабе в области фазового перехода Изинга на полимерной цепочке.

Чёрные точки на графиках 9-10 будут точками, для которых мы будем подбирать отношение сторон для модели прямоугольного Изинга по значению асферичности. Для модели Ising-ISAW точки в красных линиях показывают среднее значение асферичности в граничных точках перехода - по ним мы определим погрешность измерений кумулянта:  $r = 0.465$  и  $0.49$ ,  $U_4 = 0.340 \pm 0.006$  и  $0.348 \pm 0.006$ . В точке на зелёной линии - в точке ближайшей к пересечению (переходу) рассчитаем само значение кумулянта:  $r = 0.47$ ,  $U_4 = 0.343 \pm 0.006$ . Тогда значение критического кумулянта модели Изинга в прямоугольной решётке для Ising-ISAW  $U_4 = 0.343 \pm 0.009$ .

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

Ising-ISAW			
J	$\mathcal{A}$	r	$U_4$ Rectangular
0.831	0.415	0.465	$0.340 \pm 0.006$
0.832	0.4072	0.47	$0.343 \pm 0.006$
0.836	0.373	$0.490 \pm 0.002$	$0.348 \pm 0.006$
ISAW			
0.667	0.375	0.49	$0.349 \pm 0.006$

Таблица 6: Таблица значений критических кумулянтов прямоугольной решётки в зависимости от асферичности моделей Ising-ISAW и ISAW в областях крит. перехода и, следовательно, отношения сторон

Сравнение со значением критического кумулянта модели Ising-ISAW ( $U_4 = 0.308(8)$  [8]), рассчитанное в статье [8], показало значительное несовпадение со значениями кумулянта прямоугольной решётки с теми же показателями формы, что и у рассматриваемой модели.

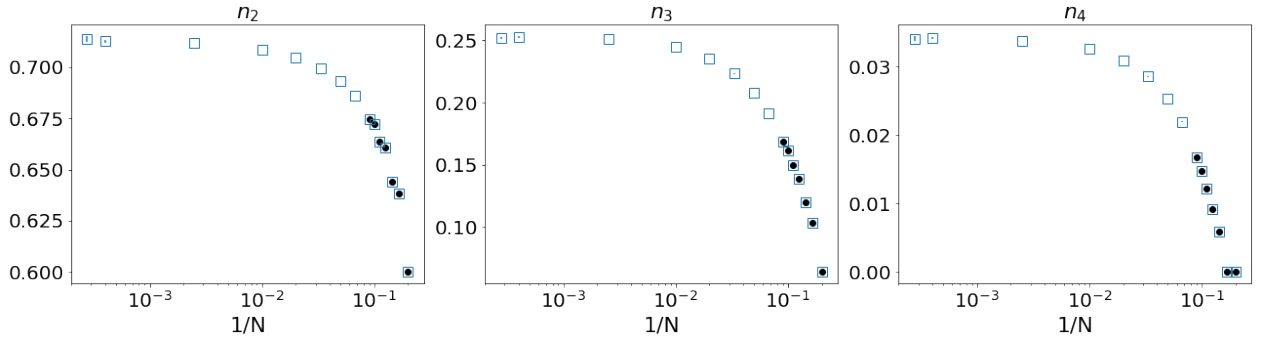


Рис. 12: Зависимостей средних долей узлов конформации с фиксированным числом соседей (от 2 до 4) модели ISAW при  $J=0$  от обратной длины  $1/N$  при длинах конформации  $N=5-3600$ . Пустые квадраты - результаты симуляций Монте-Карло, черные точки - расчёты полученные путём полного перебора возможных конформаций [2]

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

### 4.1 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. Рассмотрим пример конформации на рисунке 11 на квадратной решётке, связи между узлами которой показаны на левом рисунке 1. 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 12 - разные типы расчётов полностью совпали, что говорит о правильности используемого алгоритма.

### 4.2 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 13, а также опубликованы в работе [8].

На графиках 13 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

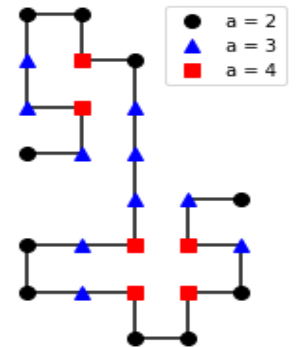


Рис. 11: Пример конформации на квадратной решётке с подсчётом соседей

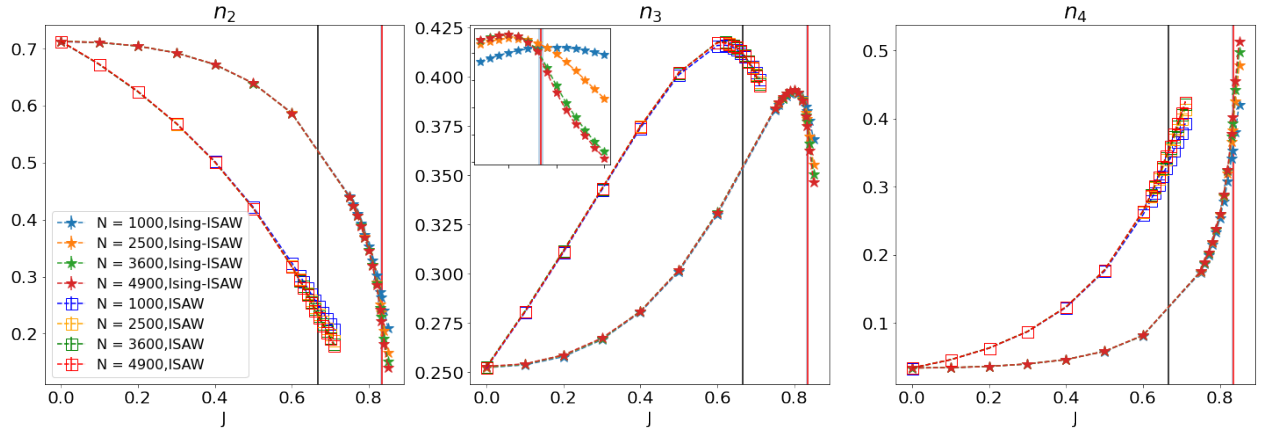


Рис. 13: Зависимость доли узлов конформации с двумя (слева), тремя (по центру) и четырьмя соседями (справа) у моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW на квадратной решётке от  $J$ . Черной линией обозначена точка фазового перехода модели ISAW, красной - Ising-ISAW, на квадратной решётке (см. таблицы 1 и 2). 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.

### 4.3 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 2.1, 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 14 - 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 (см. таблицы 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 14 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.

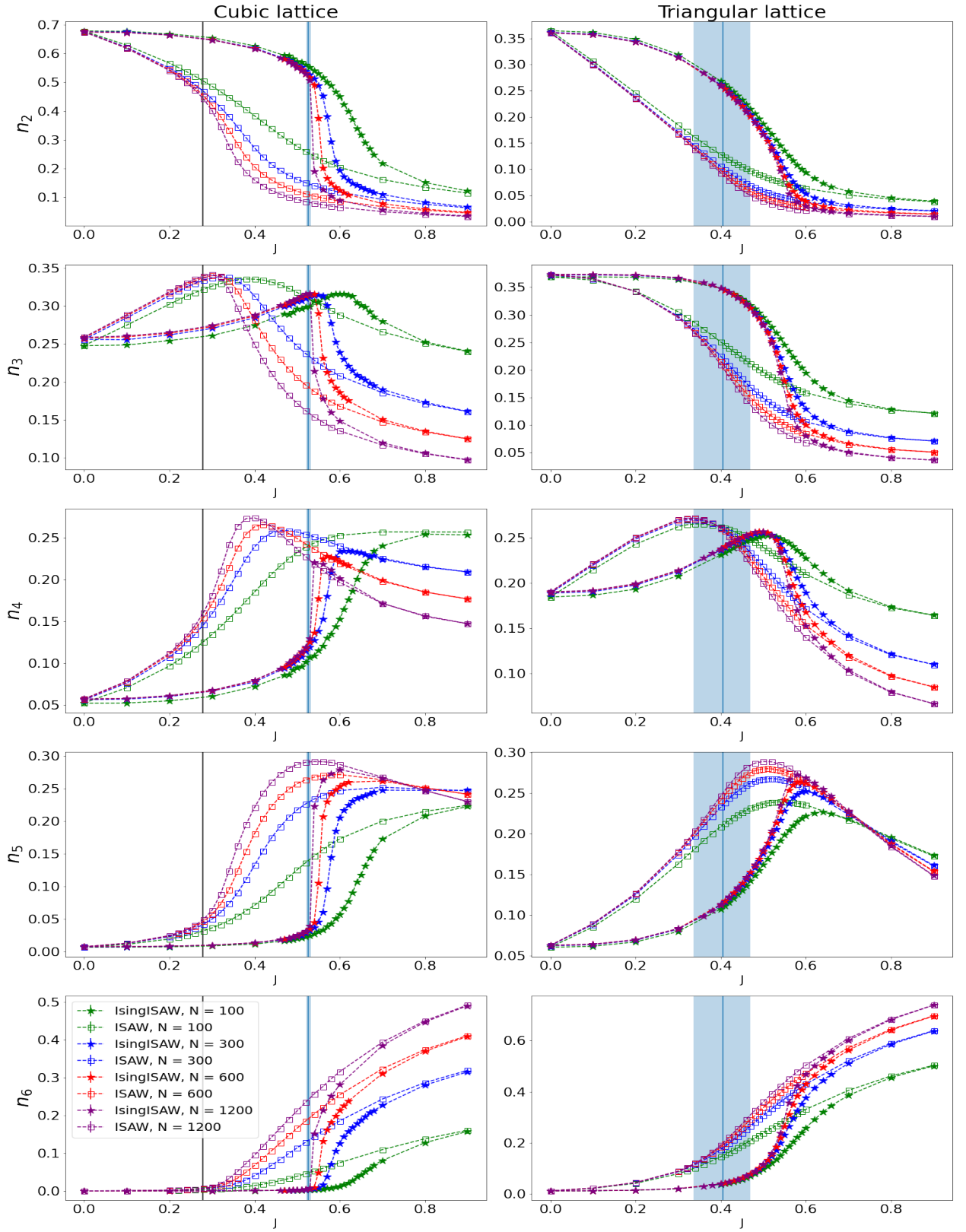


Рис. 14: Зависимость доли узлов моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW (квадраты) на кубической (слева) и треугольной решётках (справа) с 2-6 соседями (сверху вниз) от  $J$  с длинами  $N = 100$  (зеленые), 300 (красные), 600 (синие) и 1200 (фиолетовые). Вертикальные линии отмечают точки фазового перехода моделей (см. таблицы 1 и 2)

#### 4.4 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

$$y = ax + b \quad (4.1)$$

2. Лог-линейная или экспоненциальная аппроксимация

$$y = b \exp(ax) + c \quad (4.2)$$

3. Степенная или лог-лог аппроксимация

$$y = bx^a + c \quad (4.3)$$

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 15 и 16 - 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 15 и 16 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 7: Значения и погрешности коэффициентов линейного фитирования (4.1) зависимости долей узлов с 2-мя соседями на квадратной решётке модели Ising-ISAW при J=0 от исследуемого интервала длин

Результаты использования других диапазонов точек на таблице 7 показывают, что наиболее оптимальный фит (с наименьшей ошибкой) достигается при выборе точек от 250 до 4900. Это можно объяснить тем, что при вы-

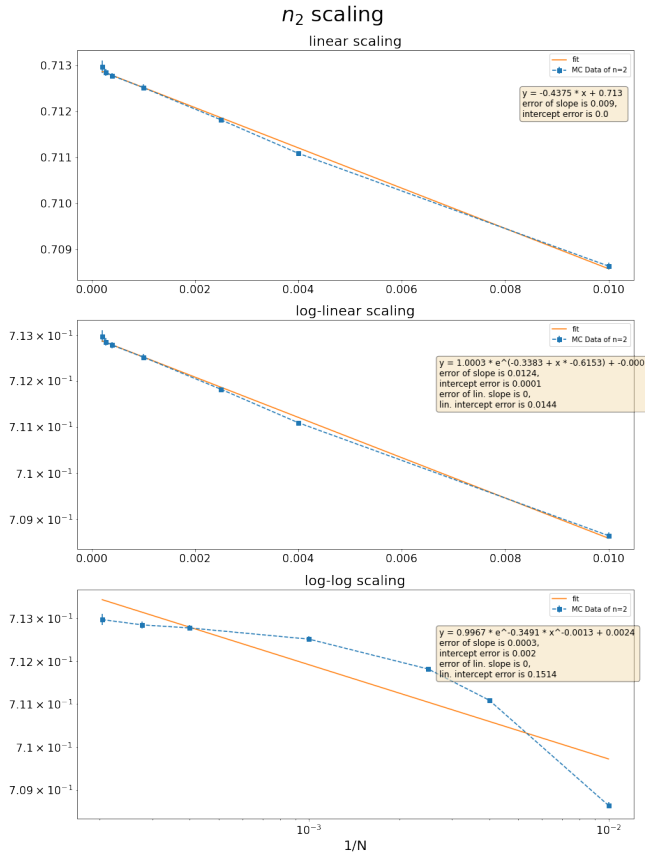


Рис. 15: Результаты аппроксимации (оранжевая линия) данных Монте-Карло о долях узлов с двумя соседями  $n_2$  модели Ising-ISAW на квадратной решётке (синие точки) различными способами на диапазоне длин 100-4900

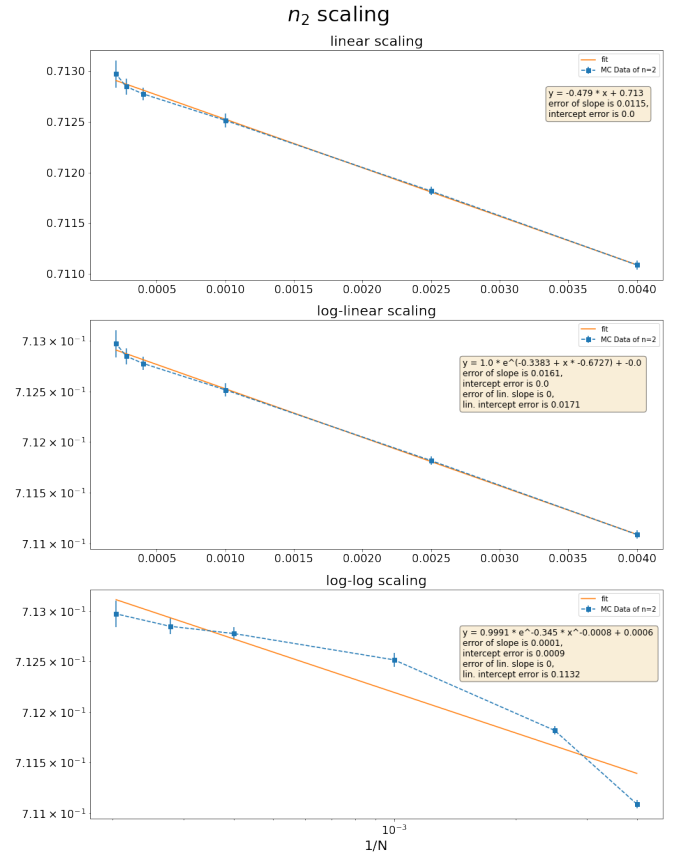


Рис. 16: Результаты аппроксимации (оранжевая линия) данных Монте-Карло о долях узлов с двумя соседями  $n_2$  модели Ising-ISAW на квадратной решётке (синие точки) различными способами на диапазоне длин 250-4900

боре 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 ([1]), результаты представлены в следующем разделе в виде графиков для узлов с 2-мя и 3-мя соседями и в виде таблицы коэффициентов линейного фитирования (4.1) без графиков.

Результаты линейного фитирования при выборе разной наименьшей рассматриваемой длины можно увидеть на таблицах 8 и 9. 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).

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

На графике 17 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).

Lattice	$\langle n_2 \rangle$		$\langle n_3 \rangle$		$\langle n_4 \rangle$	
	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 8: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 17 для длин  $N$  от 100 до 4900 (для квадратной) и 1200 (для остальных решёток)

Lattice	$\langle n_2 \rangle$		$\langle n_3 \rangle$		$\langle n_4 \rangle$	
	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 9: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 17 для длин  $N$  от 250 до 4900 (для квадратной) и от 200 до 1200 (для остальных решёток)

Из таблицы 10 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  $b$  (4.1) почти не наблюдается - они имеют как разные значения свободных членов, так и значения и даже (в случае 2-х соседей) знаки коэффициента наклона, разница который 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 10) 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 конфигурации добавит соседей).



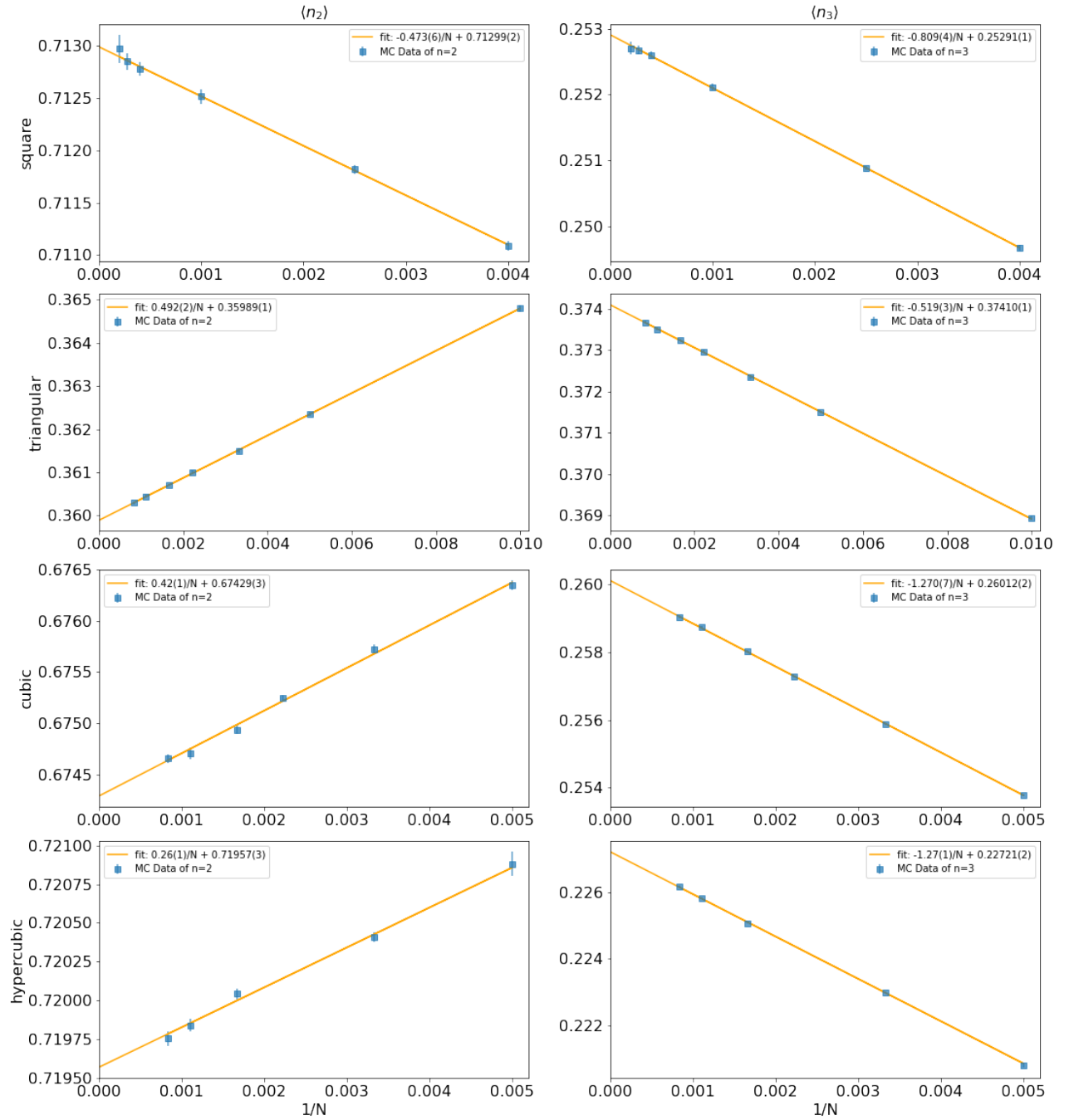


Рис. 17: Зависимость средней доли узлов с 2-мя соседями (слева) и 3-мя (справа) от обратной длины  $1/N$  в модели Изинга на случайном блуждании на квадратной, треугольной, кубической и гиперкубической (сверху вниз). Синие точки описывают результаты симуляций Монте-Карло, оранжевая линия - график линейной аппроксимации результатов, ошибки рассчитаны с учётом погрешностей полученных данных. Коэффициенты и диапазоны длин рассматриваемых данных записаны в таблице 10

	$\langle n_2 \rangle$			$\langle n_3 \rangle$			$\langle n_4 \rangle$		
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 10: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям улов с 2-4 соседями из рисунков 17 - 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 11: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям улов с 5-6 соседями

#### 4.6 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 (4.1) отображены в таблицах 10 и 11: 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 12, поэтому мы рассматриваем число соседей лишь от 2 до 6.

Рассматривая средние строки таблицы 10, где записаны коэффициенты прямых фитирования для  $n_2$  и  $n_3$  треугольной и кубической решётки соответственно, а так же средние графики на рисунке 17, мы видим примерно ту же ситуацию как и в случае сравнения треугольной с квадратной - кубическая решётка на графике 17 показывает почти чёткий линейный характер приближения в пределах погрешности наибольших длин (для  $n=3$  линейно видна значительно 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

	$\langle n_7 \rangle$			$\langle n_8 \rangle$		
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 12: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям улов с 7-8 соседями

ской 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  $a$  (4.1) для долей узлов с 3-мя соседями  $\langle n_3 \rangle$  у кубической и гиперкубической решёток (см. таблицу 10).

## 4.7 Число соседей в атмосферах Преллберга

В статье [12] в пространстве невзаимодействующих случайных блужданий без самопересечений было рассмотрено такое свойство конформации, как "атмосфера" количество возможных направлений для удлинения цепочки длины  $N$  или количество возможных  $N+1$ -х узлов.

Мы предполагаем, что данное свойство имеет связь 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.

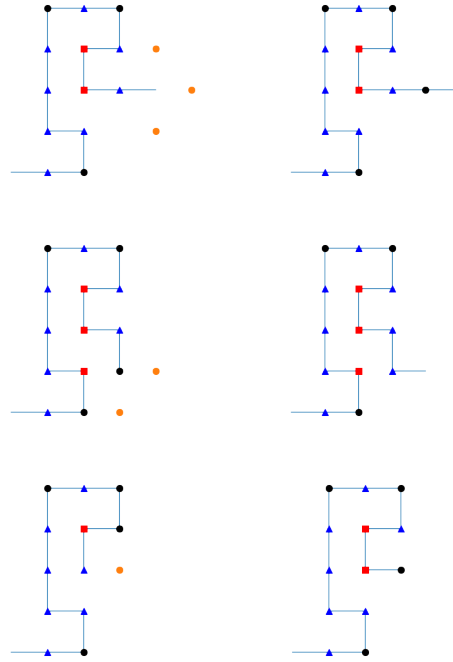


Рис. 18: Пример удлинения цепочки на квадратной решётке с атмосферой 3,2,1 (сверху вниз): слева изображена конформация до удлинения, справа - после, возможные способы добавить новый узел отмечены оранжевым, разметка узлов по количеству соседей соответствует рисунку 11

Рассмотрим верхний рисунок 18: 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 18 - 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 18) 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 18. 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 "цепоч-

ка 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 18) 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 13: Сравнение свободных членов линейных приближений вероятностей у конформации иметь  $n$ -ю атмосферу (слева) и долей мономеров с  $i$  соседями (справа) в зависимости от обратной длины конформации  $1/N$

На таблице 13 слева изображены значения свободных членов графика зависимости вероятности гомополимерной цепочки иметь атмосферу  $k$  в статье [12], 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 [4]: 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 14: 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.$

## 5 Заключение

В ходе первой части работы была рассмотрена модель Изинга на случайном блуждании без самоперечений в сравнении с её родительскими моделями в соответствующих критических областях. Несовпадение критического кумулянта при равном значении асферичности моделей показало, что форма конформации и решётки моделей слабо влияет на схожесть магнитных свойств, поскольку при сравнении не была учтена значительная разница в количестве связей между решёткой прямоугольного Изинга, полностью заполненной взаимодействующими друг с другом узлами и недостаточно плотной в крит. области конформацией модели Ising-ISAW.

Плотность связей была рассмотрена на модели Ising-ISAW на нескольких решётках в точке  $J=0$ . Методами Монте-Карло были определены характер зависимости средних долей узлов с фиксированным числом соседей от длины конформации и пределы долей на бесконечно большой длине цепочки, а так же проведено сравнение этих значений на предмет универсальности среди квадратной, треугольной, кубической и 4D-гиперкубической решёток.

Наконец, для проверки универсальности свойства средних долей узлов с фиксированным числом соседей между внутренними узлами и концами конформаций, было проведено сравнение полученных для Ising-ISAW на квадратной решётке пределов средних долей при бесконечно большой длине в точке  $J=0$  с предельными значениями вероятностей атмосфер не взаимодействующего блуждания из работы [12]. Результат показал явную разницу поведения внутреннего и граничного узла конформаций с ростом длины конформации.

## Список литературы

- [1] Github repository: Chpel/projectmagnet.
- [2] Github repository: kamilla0503/saw.
- [3] Github repository: ShroedingerCat/self-learning-monte-carlo-algorithm.
- [4] Prellberg private communication 2021.
- [5] Handan Arkin and Wolfhard Janke. Gyration tensor based analysis of the shapes of polymer chains in an attractive spherical cage. *The Journal of chemical physics*, 138(5):054904, 2013.
- [6] 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.
- [7] P-G de Gennes. *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell University Press, 1979.
- [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] T. Garel, H. Orland, and E. Orlandini. Phase diagram of magnetic polymers. *Eur. Phys. J. B*, 12:261–268, 1999.
- [11] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944.
- [12] AL Owczarek and Thomas Prellberg. Scaling of the atmosphere of self-avoiding walks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 41(37):375004, 2008.
- [13] 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.
- [14] V Privman. Study of the  $\theta$  point by enumeration of self-avoiding walks on the triangular lattice. 19(16):3287–3297, nov 1986.
- [15] 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.
- [16] 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.