

Проект №19455 "Решетчатые модели макромолекул"

Пчелинцев Илья Игоревич, БПМ-195

Содержание

1	Введение	2
1.1	Одномерная модель Изинга	2
1.2	Статсумма цепи Изинга общего случая ($h, J \neq 0$) : периодич. гран. условия и Трансфер-матрица	2
1.3	Диагонализация Трансфер-матрицы	3
1.4	Статсумма цепи Изинга общего случая ($h, J \neq 0$) : открытые гран. условия	3
1.5	Итоги	4
2	Средняя намагниченность случая $h = 0$	5
2.1	Периодические гран. условия	5
2.2	Открытые гран. условия	5
2.3	Магнитная восприимчивость	6
3	Средняя энергия	7
3.1	Проверка случая $J = 0$	7
3.2	Случай $h = 0$	8
3.3	Сравнение средней энергии моделей с периодичным и открытым гран. условиями	8
4	Теплоёмкость на спин при $h = 0$	9
4.1	Открытое гран. условие	9
4.2	Периодическое гран. условие	10
5	Свободная энергия	11
6	Разница между открытым и периодичным случаем	12
6.1	Средняя энергия системы (равное число спинов)	12
6.2	Средняя энергия системы (равное число рёбер)	13
6.3	Теплоёмкость системы (равное число рёбер)	13
6.4	Квадрат намагниченности системы (равное число рёбер)	14
7	Сравнение решения одномерной модели Изинга с расчётами Монте-Карло	15
8	Поведение модели Изинга на блужданиях без самопересечений вблизи крит. температуры	16
8.1	Расчёты крит. экспонент при наблюдении коллапса данных	17
8.2	Определение погрешностей измерений экспонент	17
9	Модель Изинга на прямоугольной решётке	19
9.1	Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга	19
9.2	Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий	20
9.3	Связь тензора инерции и тензора вращения	22
9.4	Показатели формы блуждания из тензора вращения	23
9.5	Свойства моделей вблизи фазового перехода с учётом показателей формы	24
10	Оценка работы алгоритма для трёхмерной модели Изинга	26

1 Введение

1.1 Одномерная модель Изинга

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

$$\sigma_j = \pm 1$$

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

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

Внутренним взаимодействием между двумя соседними моментами считаем:

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

Тогда Гамильтонианом системы из N спинов будет:

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

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

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

Для начала перепишем формулу (1.3) в другой форме:

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

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

Тогда статсумма такой модели будет равна:

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

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

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

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

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

1.3 Диагонализация Трансфер-матрицы

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

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

Диагонализированная матрица будет выглядеть как:

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

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

Найдём собственные значения λ_{\pm} и их собственные вектора:

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

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

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

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

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

Эти формулы понадобятся нам позднее.

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

Таким образом:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.5 Итоги

Нам известна статсумма модели для общего случая:

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

- для периодического граничного условия

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

- для открытого погран. случая, где

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

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

2 Средняя намагниченность случая $h = 0$

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

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

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

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

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

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

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

Следовательно, при подстановке в (2.2), получим:

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

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

2.1 Периодичные гран. условия

Перед этим для простоты найдём производные всех составляющих статсумм:

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

и при ($h = 0$) = 0

Тогда:

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

и при ($h = 0$) так же = 0

Таким образом:

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

2.2 Открытые гран. условия

Найдём дополнительные значения составляющих Z_{OVC}

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

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

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

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

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

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

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

2.3 Магнитная восприимчивость

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

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

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

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

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

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

3 Средняя энергия

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

Нам известна формула средней энергии:

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

Предварительно будет нелишним найти значения составных частей формулы и их производных по β

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

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

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

Таблица 1: Производные составных значений статсумм

3.1 Проверка случая $J = 0$

Теперь можно перейти к проверке по предельным случаям.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.2 Случай $h = 0$

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

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

Попробуем вывести ту же формулу через статсумму общего случая.

Начнём со статсуммы:

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

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

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

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

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

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

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

Итоговая формула средней энергии будет:

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

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

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

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

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

4 Теплоёмкость на спин при $h = 0$

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

4.1 Открытое граничное условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Раскрыв все λ_+ и подставив в формулу теплоёмкости на спин, получим:

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

Формулы полностью совпали.

4.2 Периодическое гран. условие

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

Начнём с формулы статсуммы:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5 Свободная энергия

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

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

где

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

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

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

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

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

Результаты снова совпали с формулой из учебника [1].

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

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

6 Разница между открытым и периодичным случаем

Будем рассматривать разность между различными энергетическими величинами при разных случаях.

6.1 Средняя энергия системы (равное число спинов)

Найдём разность средней энергии открытого и периодичного случая:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$J = 0 : 0$$

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

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

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

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

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

Теперь вернёмся к формуле (6.2) и продифференцируем всю скобку по β

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

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

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

$$J = 0 : 0$$

6.2 Средняя энергия системы (равное число рёбер)

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

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

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

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

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

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

6.3 Теплоёмкость системы (равное число рёбер)

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

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

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

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

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

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

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

2

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

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

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

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

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

$$J = 0 : 0$$

6.4 Квадрат намагниченности системы (равное число рёбер)

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

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

где H - гамильтониан системы (1.3).

С другой стороны:

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

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

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

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

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

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

7 Сравнение решения одномерной модели Изинга с расчётами Монте-Карло

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

где ν - критическая экспонента

Также мы можем определить другие экспоненты - к примеру, в нормальной модели Изинга определяются экспоненты γ , α и β для магнитной восприимчивости, теплоёмкости и намагниченности соответственно:

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

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

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

Рассмотрим случай квадрата намагниченности:

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

Воспользовавшись (8.2), избавимся от t :

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

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

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

Где L - размер системы (для квадратной решётки кол-во спинов = $L * L$)
 m_{02} обладает следующими свойствами:

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

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

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

Тогда получим:

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

8.1 Расчёты крит. экспонент при наблюдении коллапса данных

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

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

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

$$T_C = 1.1976$$

$$\beta = 0.125$$

$$\nu = 1.01$$

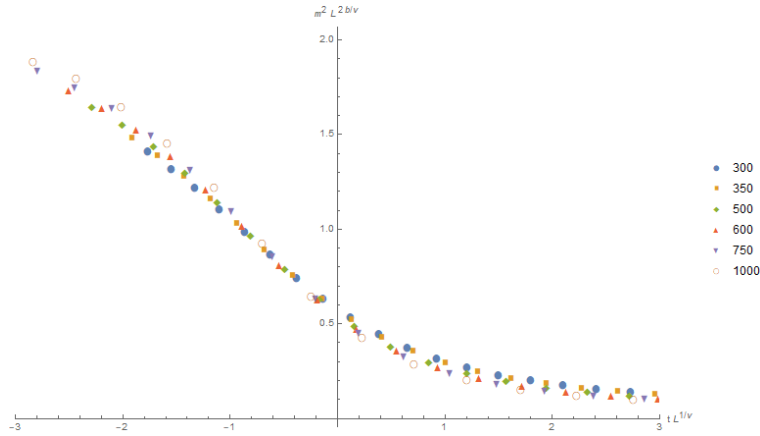


Рис. 1: График зависимости значений шкалирующей функции квадрата намагниченности от приведённой температуры при крит. экспонентах, обеспечивших наилучший коллапс данных

8.2 Определение погрешностей измерений экспонент

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

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

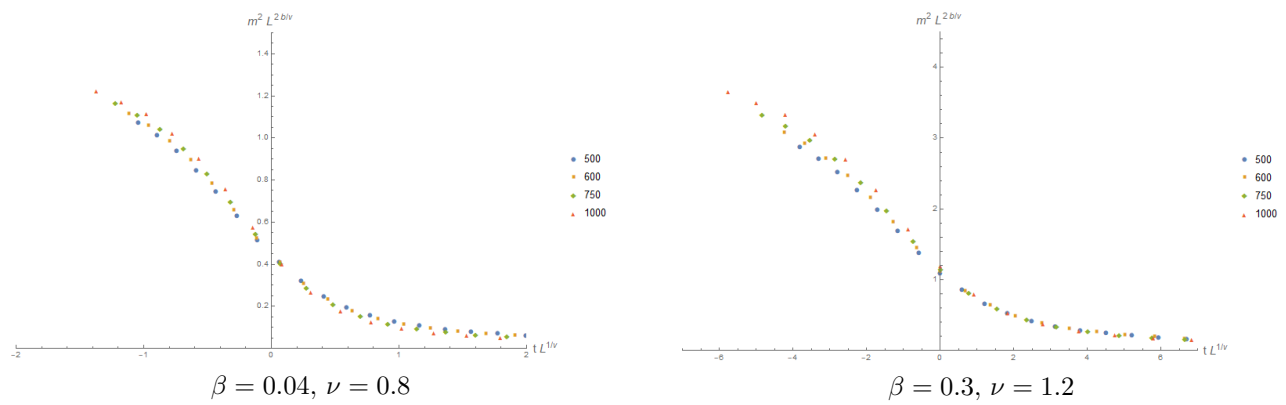


Рис. 2: Погрешность критических экспонент и их влияние на коллапс данных

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

9 Модель Изинга на прямоугольной решётке

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

9.1 Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга

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

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

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

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

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

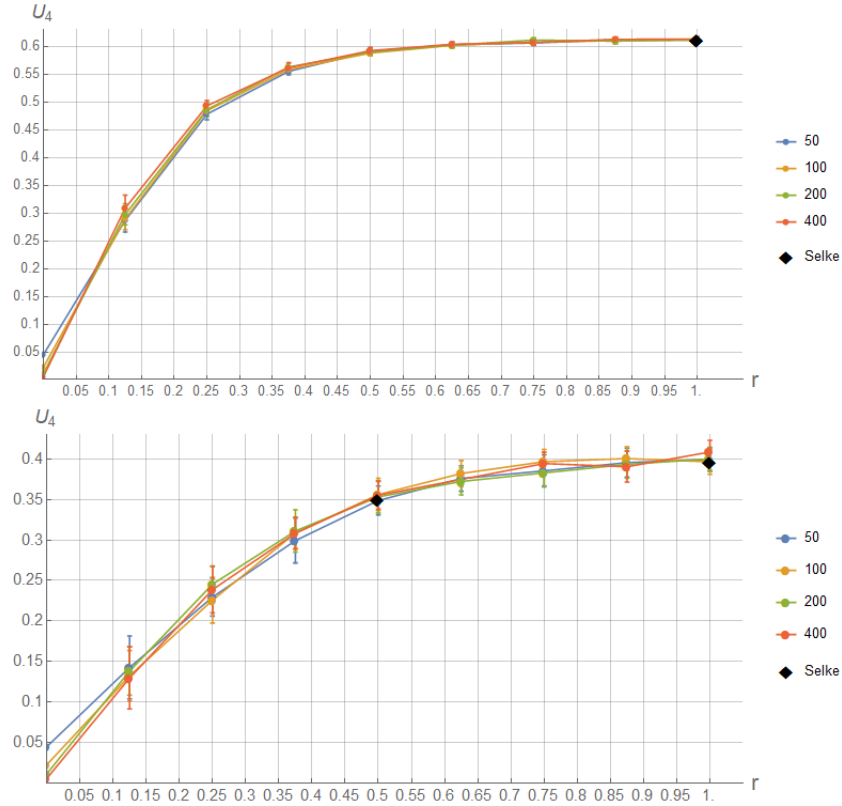


Рис. 3: График зависимости значения кумулянта Биндера (9.1) в крит. точке (9.2) от Aspect Ratio при открытых (сверху) и периодических гран. условиях (снизу). Черные точки - значения критических кумулянтов из работы W. Selke [8]

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

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

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

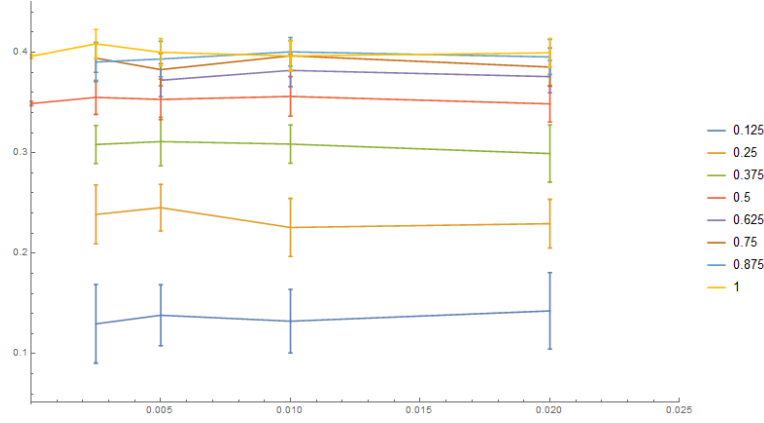


Рис. 4: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при открытых гран. условиях

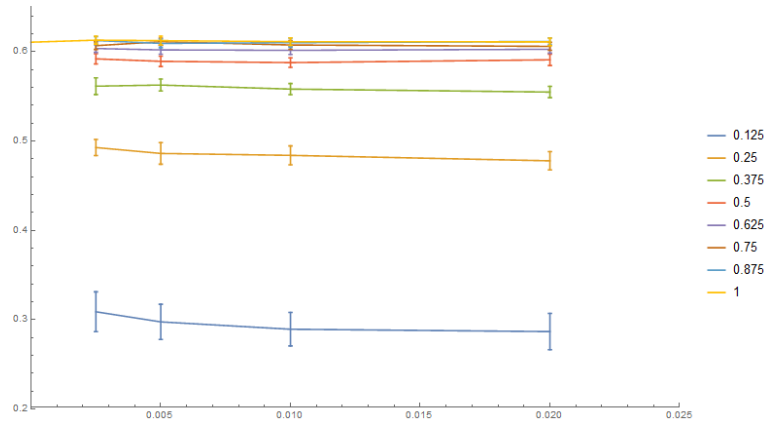


Рис. 5: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при периодических гран. условиях

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

9.2 Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Так же можно представить i -й вектор блуждания как:

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

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

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

Раскроем суммирование у учётов зависимостей индексов:

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

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

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

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

9.3 Связь тензора инерции и тензора вращения

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

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

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

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

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

В тоже время, формулы диагональных элементов принципиально отличаются:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

9.4 Показатели формы блуждания из тензора вращения

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

В нашем двумерном случае,

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

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

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

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

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

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

9.5 Свойства моделей вблизи фазового перехода с учётом показателей формы

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

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

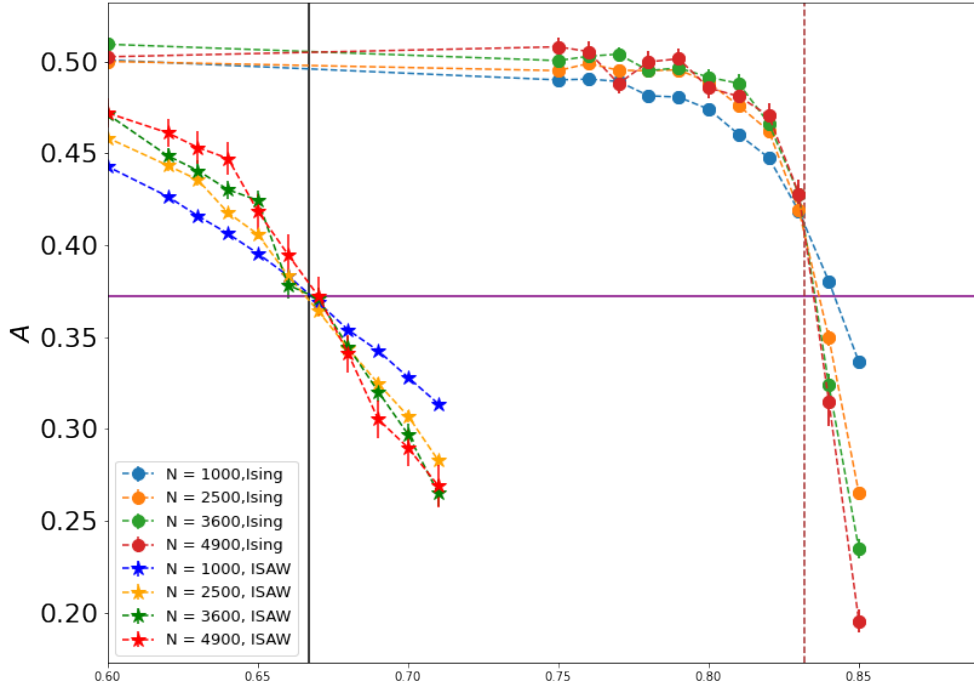


Рис. 6: График зависимости значения асферичности от константы взаимодействия для моделей взаимодействующего блуждания (слева) и Изинга на полимерной цепочке (справа)

Вертикальными линиями обозначены точки фазового перехода моделей: пунктирной линией отмечена точка перехода в модели Изинга на гомополимерной цепочке, а черной сплошной - у модели ISAW. Горизонтальной линией отмечено значение асферичности в критической области модели ISAW из статьи Пелиссетто ((4.10) [9]). Однако перед тем как найти значение кумулянта для модели прямоугольного Изинга, необходимо подобрать такое отношение сторон, чтобы асферичность полученного прямоугольника совпадала со значением асферичности в точках перехода соответствующих моделей.

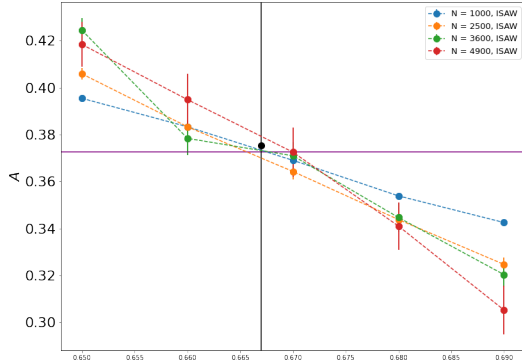


Рис. 7: График 6, увеличенный в масштабе в области фазового перехода модели взаимодействующих блужданий

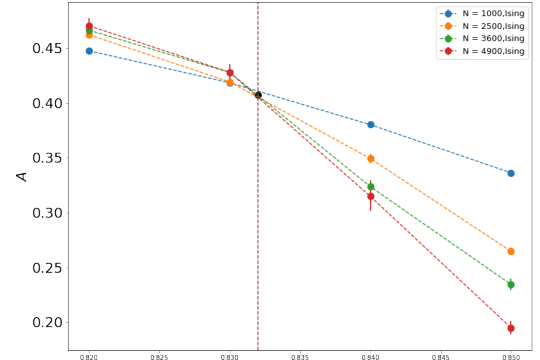


Рис. 8: График 6, увеличенный в масштабе в области фазового перехода Изинга на полимерной цепочке

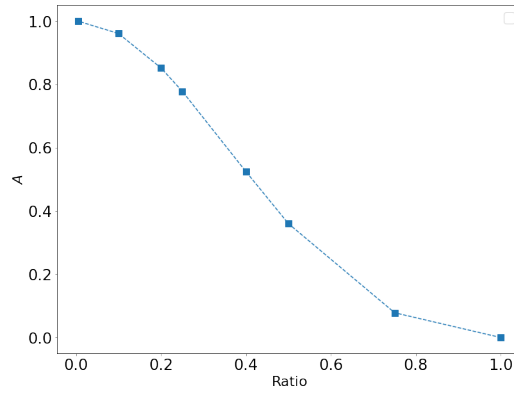


Рис. 9: График зависимости асферичности прямоугольной решётки от отношения сторон

Чёрные точки на графиках 7-8 будут точками, для которых мы будем подбирать отношение сторон для модели прямоугольного Изинга по значению асферичности: примерно 0.47 для PolIsing и 0.49 для ISAW. Тогда критический кумулянт модели Изинга в прямоугольной решётке рассчитан и равен 0.342 ± 0.006 и 0.349 ± 0.006 соответственно.

10 Оценка работы алгоритма для трёхмерной модели Изинга

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

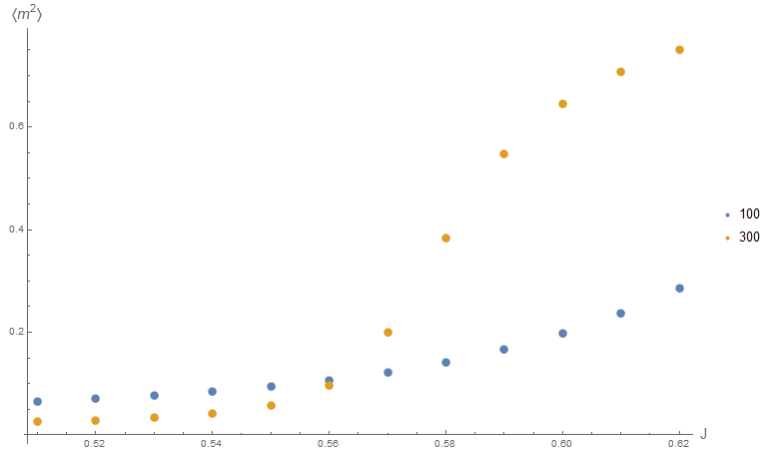


Рис. 10: График зависимости квадрата намагниченности от J

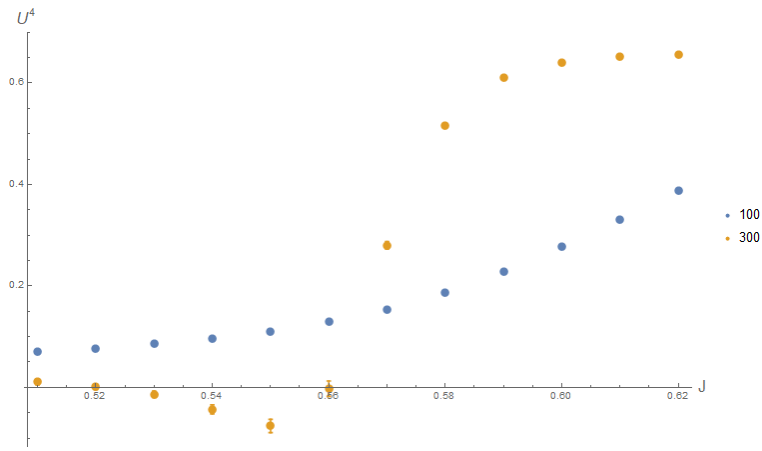


Рис. 11: График зависимости значения кумулянта Биндера от J

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

Список литературы

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