

Проект №19455 "Решетчатые модели макромолекул"

Пчелинцев Илья Игоревич, БПМ-192

Оглавление

1	2 курс	3
1.1	Введение	4
1.1.1	Одномерная модель Изинга	4
1.1.2	Статсумма цепи Изинга общего случая ($h, J \neq 0$) : периодич. гран. условия и Трансфер-матрица	4
1.1.3	Диагонализация Трансфер-матрицы	5
1.1.4	Статсумма цепи Изинга общего случая ($h, J \neq 0$) : открытые гран. условия	5
1.1.5	Итоги	6
1.2	Средняя намагниченность случая $h = 0$	7
1.2.1	Периодические гран. условия	7
1.2.2	Открытые гран. условия	7
1.2.3	Магнитная восприимчивость	8
1.3	Средняя энергия	9
1.3.1	Проверка случая $J = 0$	9
1.3.2	Случай $h = 0$	10
1.3.3	Сравнение средней энергии моделей с периодичным и открытым гран. условиями	10
1.4	Теплоёмкость на спин при $h = 0$	11
1.4.1	Открытое гран. условие	11
1.4.2	Периодическое гран. условие	11
1.5	Свободная энергия	13
1.6	Разница между открытым и периодичным случаем	14
1.6.1	Средняя энергия системы (равное число спинов)	14
1.6.2	Средняя энергия системы (равное число рёбер)	15
1.6.3	Теплоёмкость системы (равное число рёбер)	15
1.6.4	Квадрат намагниченности системы (равное число рёбер)	16
1.7	Сравнение решения одномерной модели Изинга с расчётами Монте-Карло	17
1.8	Поведение модели Изинга на блужданиях без самопересечений вблизи крит. температуры	18
1.8.1	Расчёты крит. экспонент при наблюдении коллапса данных	19
1.8.2	Определение погрешностей измерений экспонент	19
1.9	Модель Изинга на прямоугольной решётке	21
1.9.1	Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга	21
1.9.2	Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий	23
1.9.3	Связь тензора инерции и тензора вращения	24
1.9.4	Показатели формы блуждания из тензора вращения	25
1.9.5	Асферичность прямоугольных решёток	26
1.9.6	Свойства моделей вблизи фазового перехода с учётом показателей формы	28
1.10	Оценка работы алгоритма для трёхмерной модели Изинга	31
1.10.1	Расчёт магнитных свойств	31

2	3 курс	32
2.1	Геометрические свойства модели Ising-ISAW с точки зрения числа соседей в узлах	33
2.1.1	Введение	33
2.1.2	Особенности ранних результатов на квадратной решётке	33
2.1.3	Сравнение модели Изинга и полимерной цепочки в решетках с 2-6 возможными соседями мономеров	34
2.1.4	Алгоритм исследования характера зависимости значения долей узлов от длины при $J=0$	37
2.1.5	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на треугольной решётке с квадратной в $J=0$	39
2.1.6	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на решётках с большим числом сосе- дей в $J=0$	41
2.1.7	Обобщение до случайных блужданий с самопересечениями	41
2.1.8	Число соседей в атмосферах Преллберга	44
2.1.9	Атмосферы Преллберга в возвратных случайных блужданиях	47
3	Приложение	48
3.1	Литературный обзор	49
3.1.1	Livne, Meirovich: Polymers Adsorbed on a surface	49
3.1.2	Madras, Sokal: The Pivot Algorithm	50
3.1.3	Спицер, Основные принципы случайного блуждания, глава 3	50
3.2	Программно-техническое приложение	51
3.2.1	Применение jit-компиляции при программировании на языке Python	51

Глава 1

2 курс

1.1 Введение

1.1.1 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

$$H_h = - \sum_{j=1}^N h \sigma_j \quad (1.1.1)$$

Внутренним взаимодействием между двумя соседними моментами считаем:

$$H_J = - \sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j \quad (1.1.2)$$

Тогда Гамильтонианом системы из N спинов будет:

$$H = -h \sum_{j=1}^N \sigma_j - J \sum_{(i,j)} (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \dots + \sigma_{N-1} \sigma_N) \quad (1.1.3)$$

1.1.2 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 (1.1.3) в другой форме:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} \quad (1.1.4)$$

Учитывая периодические гран. условия $(\sigma_{N+1} = \sigma_1)$, то формулы (1.1.3) и (1.1.4) тождественно равны.

Тогда статсумма такой модели будет равна:

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N \exp(\beta J \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{1}{2} \beta h (\sigma_j + \sigma_{j+1})) = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \quad (1.1.5)$$

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:

$$T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta h) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta h) \end{pmatrix} \quad (1.1.6)$$

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

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

1.1.3 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:

$$T^D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad (1.1.7)$$

$$(T^D)^N = \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \quad (1.1.8)$$

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

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

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

$$R = \begin{pmatrix} e^{\beta J} \lambda_{+2} & e^{\beta J} \lambda_{-2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.9)$$

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2e^{\beta J} Q} & 1 - \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \\ -\frac{1}{2e^{\beta J} Q} & \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \end{pmatrix} \quad (1.1.10)$$

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

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:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.1.11)$$

1.1.4 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 (1.1.4) с корректировкой под открытые условия:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} - \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_N) \quad (1.1.12)$$

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

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

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:

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) - \lambda_-^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h \right) \quad (1.1.13)$$

1.1.5 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

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

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

1.2 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:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{ZN} \int S e^{-\beta H}, H = -h \sum_{j=1}^N \sigma_j = -hS \quad (1.2.1)$$

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

$$\frac{1}{ZN} \int S e^{-\beta H} = \frac{\partial \text{Log}[Z_{J=0}]}{\partial h} \frac{1}{\beta N} = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} \quad (1.2.2)$$

В этом случае Z берется сразу при условии ($J = 0$), её гамильтонианом для N спинов при периодичном и открытом гран. условии будет (1.1.1), а статсуммой будет формула (30.8) при (30.10) из учебника Свендсена [16]:

$$Z_{J=0} = (2 \cosh \beta h)^N \quad (1.2.3)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial h} = \beta N 2^N (\cosh \beta h)^{N-1} \sinh \beta h \quad (1.2.4)$$

Следовательно, при подстановке в (1.2.2), получим:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \tanh(\beta h) \quad (1.2.5)$$

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

1.2.1 Периодичные гран. условия

Перед этим для простоты найдём производные всех составляющих статсумм:

$$(Q)'_h = \frac{1}{2\sqrt{e^{2\beta J} \cosh(\beta h)^2 - 2 \sinh(2\beta J)}} (e^{2\beta J} 2 \cosh(\beta h) \sinh(\beta h) \beta) \quad (1.2.6)$$

и при ($h = 0$) = 0

Тогда:

$$(\lambda_{\pm})'_h = e^{\beta J} \sinh(\beta h) \beta \pm (Q)'_h \quad (1.2.7)$$

и при ($h = 0$) так же = 0

Таким образом:

$$\langle \sigma_{PBC} \rangle = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \frac{1}{Z\beta N} \left(N \lambda_+^{N-1} (\lambda_+)'_h + \lambda_-^{N-1} (\lambda_-)'_h \right) = 0 \quad (1.2.8)$$

1.2.2 Открытые гран. условия

Найдём дополнительные значения составляющих Z_{OBC}

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

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

$$\lambda_{\pm(h=0)} = e^{\beta J} \pm \sqrt{e^{2\beta J} - (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J})} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J} \quad (1.2.9)$$

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

Рассмотрим производную Z_{OBC} по h , учитывая дифференцирование произведения и все полученные ранее результаты ((1.2.6), (1.2.7), (1.2.9))

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial h} = & \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} + \beta \sinh \beta h \right) - \\ & - \lambda_-^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} - \beta \sinh \beta h \right) =_{h=0} 0 \quad (1.2.10) \end{aligned}$$

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

1.2.3 Магнитная восприимчивость

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

Учитывая формулу намагниченности (1.2.1) и то, что первая производная статсуммы (1.2.10) 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.

1.3 Средняя энергия

Чтобы удостовериться в правильности полученной формулы для статсуммы общего случая открытого гран. условия (1.1.13), проверим её на предельных условиях ($h = 0$, $J = 0$), поскольку они были рассмотрены в учебнике [16].

Нам известна формула средней энергии:

$$\langle U \rangle = -\frac{\partial \text{Log}[Z]}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (1.3.1)$$

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

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

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 1.1: Производные составных значений статсумм

1.3.1 Проверка случая $J = 0$

Теперь можно перейти к проверке по предельным случаям.

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

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

Как и ожидалось, статсуммы совпали с расчетами учебника [16], 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 [16], что говорит о правильности формулы для статсуммы обобщенного случая.

1.3.2 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 A_- $h=0$ 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:

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

1.3.3 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 (1.1.11) для нахождения средней энергии через (1.3.1) и таблицей производных, получим:

$$\begin{aligned} \langle E_{PBC(h=0)} \rangle &= \frac{1}{Z_{PBC}(h=0)} (N\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)'_\beta + N\lambda_-^{N-1}(\lambda_-)'_\beta) = \\ &= JN2^N \sinh \beta J \cosh \beta J \frac{(\cosh \beta J)^{N-2} + (\sinh \beta J)^{N-2}}{(\cosh \beta J)^N + (\sinh \beta J)^N} = \\ &= JN2^N \tanh \beta J \frac{1 + (\tanh \beta J)^{N-2}}{1 + (\tanh \beta J)^N} \approx JN2^N \tanh \beta J \end{aligned}$$

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

1.4 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 C в случае нулевого поля.

1.4.1 Открытое гран. условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

$$c = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{N k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} \approx k_B \beta^2 J^2 (\text{sech} \beta J)^2 \quad (1.4.1)$$

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:

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

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.

1.4.2 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:

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

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

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

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:

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

1.5 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 [16].

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:

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

1.6 Разница между открытым и периодичным случаем

Будем рассматривать разность между различными энергетическими величинами при разных случаях.

1.6.1 Средняя энергия системы (равное число спинов)

Найдём разность средней энергии открытого и периодичного случая:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial \text{Log}[Z_{OBC}]}{\partial \beta} + \frac{\partial \text{Log}[Z_{PBC}]}{\partial \beta} = -\frac{\partial \text{Log}[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}]}{\partial \beta} \quad (1.6.1)$$

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

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

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

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial (\text{Log}[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}])}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\text{Log}[\frac{A_+}{\lambda_+}] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{A_-}{A_+} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1}\right) \right) \quad (1.6.2)$$

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 (1.6.2) и продифференцируем всю скобку по β

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} + \frac{(\lambda_+)'_{\beta}}{\lambda_+} + N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} - (N-1) \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-2} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+}\right) - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} \quad (1.6.3)$$

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 (1.6.3), получим:

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

$$J = 0 : 0$$

1.6.2 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 (1.6.2) станет:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right) \right) \quad (1.6.4)$$

Все дополнительные расчёты производных мы сделали в предыдущем подразделе, поэтому перейдём к изменённой формуле, аналогичной (1.6.3), и затем сразу к предельным случаям:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} - N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} \quad (1.6.5)$$

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

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

1.6.3 Теплоёмкость системы (равное число рёбер)

Формулу для теплоёмкости системы возьмём из (1.4.1) без деления на N :

$$c = \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \text{Log}[Z]}{\partial \beta^2} \quad (1.6.6)$$

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 (1.6.4):

$$c_{OBC}^{N+1} - c_{PBC}^N = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \text{Log}\left[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}\right] = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left(\text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right) \right) \quad (1.6.7)$$

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

$$\begin{aligned} (\text{Log}[A_+])''_{\beta} &= \frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} - \left(\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+}\right)^2 \\ &= \left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right)\right)''_{\beta} = \\ &= N(N-1) \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-2} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta}{}^2 \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)''_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + 2N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+}\right)''_{\beta} \end{aligned}$$

2

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

Все вспомогательные расчёты для предельных случаев были сделаны в Wolfram Mathematica (Проект2.pdf, Теплоёмкость) [1], поэтому пропустим этот шаг и перейдём к итоговым выражениям:

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

$$J = 0 : 0$$

1.6.4 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:

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} M^2 e^{-\beta H}, \quad (1.6.8)$$

где H - гамильтониан системы (1.1.3).

С другой стороны:

$$\frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} M^2 e^{-\beta H} = \frac{1}{\beta^2} \left(\frac{\partial^2 \log Z}{\partial h^2} + \left(\frac{\partial \log Z}{\partial h} \right)^2 \right) = \langle M^2 \rangle \quad (1.6.9)$$

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 (1.6.4) и (1.6.7). Опять же, мы берём $N+1$ спин для открытого условия, и N для периодического. Тогда:

$$\langle M_{OBC}^2 \rangle - \langle M_{PBC}^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \text{Log} \left[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}} \right] = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \left(\text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1 \right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \right) \quad (1.6.10)$$

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

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

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

1.7 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 [1])

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

1.8 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:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C} \quad (1.8.1)$$

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

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (1.8.2)$$

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:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (1.8.3)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.8.4)$$

$$m \sim |t|^{-\beta} \quad (1.8.5)$$

Рассмотрим случай квадрата намагниченности:

$$m^2 \sim |t|^{-2\beta} \quad (1.8.6)$$

Воспользовавшись (1.8.2), избавимся от t :

$$m^2 \sim \xi^{2\beta/\nu} \quad (1.8.7)$$

учитывая поведение корреляционной длины в конечноразмерных системах (книга "Monte Carlo Methods in Statistical Physics график 4.1 и стр. 232-233) [12], мы можем представить функцию квадрата намагниченности в виде:

$$m^2 = \xi^{-2\beta/\nu} m_{02}(L/\xi) \quad (1.8.8)$$

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 (1.8.8) содержит неизвестную нам корреляционную длину, преобразуем её с новой безразмерной функцией:

$$\tilde{m}_{02}(x) = x^{-2\beta} m_{02}(x^\nu) \quad (1.8.9)$$

Тогда получим:

$$m^2 = L^{-2\beta/\nu} \tilde{m}_{02}(L^{1/\nu}|t|) \quad (1.8.10)$$

1.8.1 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 (1.8.10):

$$\tilde{m}_{02} = L^{2\beta/\nu} m_L^2(t) \quad (1.8.11)$$

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> [2]). Наилучший коллапс данных наблюдался при:

$$T_C = 1.1976$$

$$\beta = 0.125$$

$$\nu = 1.01$$

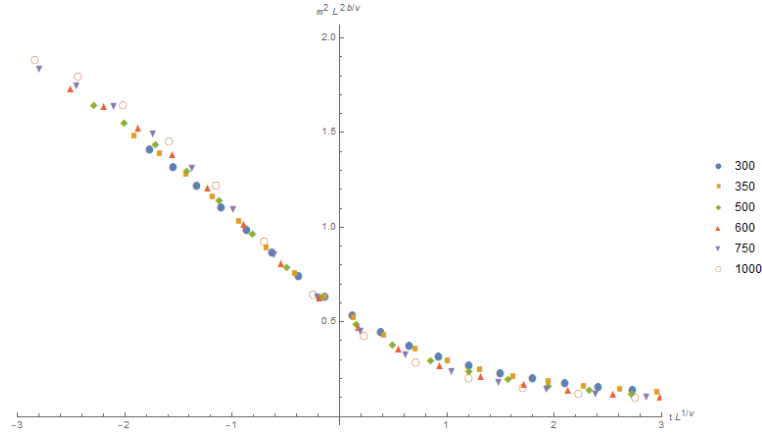


Рис. 1.1: График зависимости значений шкалирующей функции квадрата намагниченности от приведенной температуры при крит. экспонентах, обеспечивших наилучший коллапс данных

1.8.2 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.

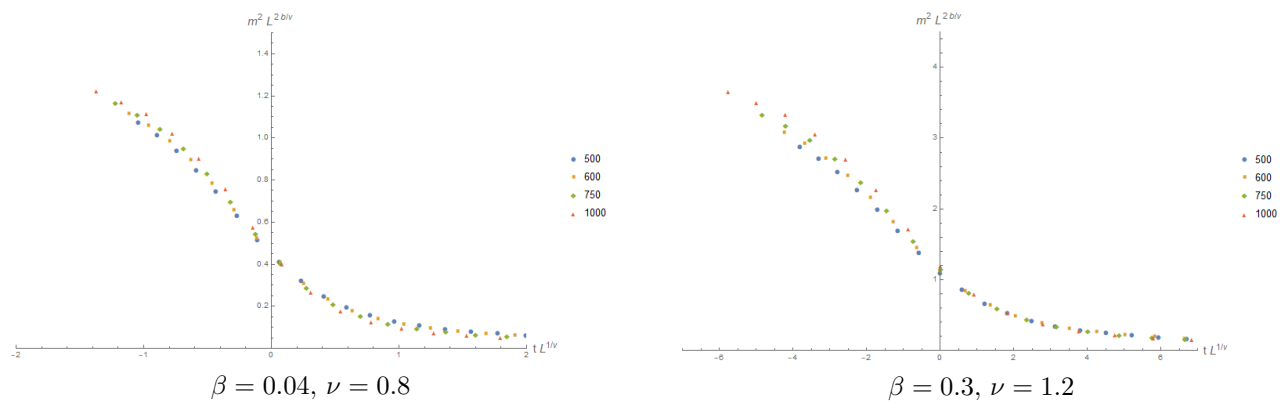


Рис. 1.2: Погрешность критических экспонент и их влияние на коллапс данных

Из графиков видно, что несмотря на колоссальное отличие от рассчитанных из литературы [12] 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.

1.9 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

1.9.1 Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга

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

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \quad (1.9.1)$$

где $\langle m^2 \rangle$ - средний квадрат удельной намагниченности, $\langle m^4 \rangle$ - средняя удельная намагниченность в чет-вертой 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 [4] и Камиллы Файзулиной [3] - 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 [15]:

$$J = \frac{1}{2.26918...} \quad (1.9.2)$$

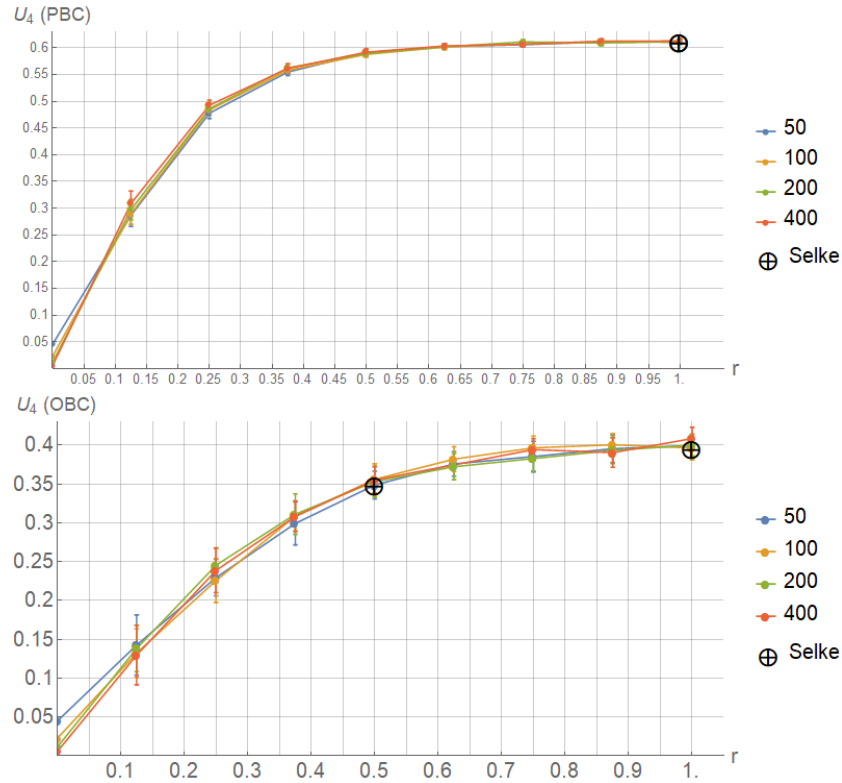


Рис. 1.3: График зависимости значения кумулянта Биндера (1.9.1) в крит. точке (1.9.2) от Aspect Ratio при открытых (снизу) и периодических гран. условиях (сверху). Черные точки - значения критических кумулянтов из работы W. Selke [15]

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. 1.3

Boundary	r	U_4
OBC	1	0.396 ± 0.002
OBC	0.5	0.349 ± 0.002
PBC	1	0.61069...

Таблица 1.2: Таблица значений критических кумулянтов для прямоугольных решёток из статьи У. Сельке [15]

снизу) и периодических (рис. 1.3 сверху) значения кумулянта стремятся к нулю с увеличением длины цепочки (см. Проект6.pdf [1]). Черными точками отмечены значения критического кумулянта из работы Уолтера Сельке [15]:

Эти же значения отмечены в графиках 1.4 и 1.5 зависимости крит. кумулянта от обратной длины стороны как крайние левые (в нуле - так обозначен случай термодинамического предела).

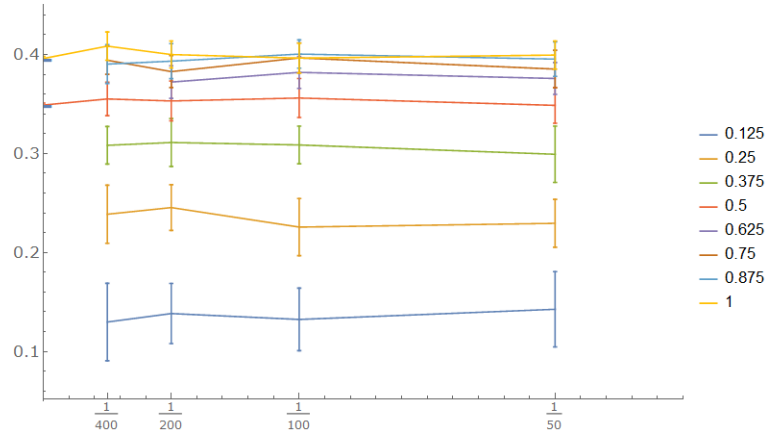


Рис. 1.4: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при открытых гран. условиях

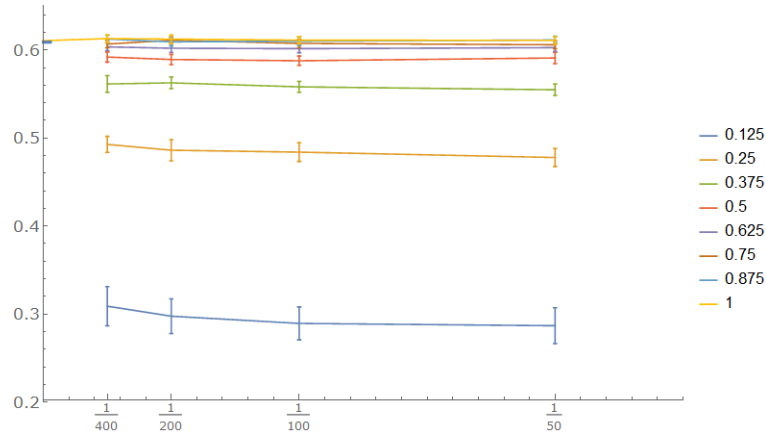


Рис. 1.5: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при периодических гран. условиях

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

1.9.2 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 системы (сумма w_k в скобке) [7]:

$$R_g^2 = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left(w_i - \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_k \right)^2 = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^N (w_i - w_j)^2 \quad (1.9.3)$$

(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 [6] :

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{c,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{c,\beta}) \quad (1.9.4)$$

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.

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{(N+1)} \sum_{i=0}^N w_{i,\alpha} w_{i,\beta} \quad (1.9.5)$$

$$\sum_{i=0}^N w_i = 0 \quad (1.9.6)$$

Рассмотрим формулу (1.9.4). Так как w_c - центра масс блуждания, то:

$$w_c = \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_k \quad (1.9.7)$$

Так же можно представить i -й вектор блуждания как:

$$w_i = \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_i \quad (1.9.8)$$

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:

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

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

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

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{k,\beta}) \quad (1.9.9)$$

совпадает с формулой (4.1) из статьи о взаимодействующих блужданиях [7], что значит что используемое ими понятие "тензора вращения" совпадает.

1.9.3 Связь тензора инерции и тензора вращения

Можно заметить некоторое сходство в расчётах недиагональных элементов тензора инерции J и тензора вращения из статей [6, 7]. Действительно, для системы из N материальных точек единичной массы тензор инерции в системе центра масс рассчитывается следующим образом:

$$J = \begin{pmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{zz} \end{pmatrix} \quad (1.9.10)$$

$$J_{xy} = J_{yx} = - \sum_{i=1}^N x_i y_i \quad (1.9.11)$$

$$J_{yz} = J_{zy} = - \sum_{i=1}^N y_i z_i \quad (1.9.12)$$

$$J_{xz} = J_{zx} = - \sum_{i=1}^N x_i z_i \quad (1.9.13)$$

В тоже время, формулы диагональных элементов принципиально отличаются:

$$J_{xx} = \sum_{i=1}^N y_i^2 + z_i^2 \quad (1.9.14)$$

$$J_{yy} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + z_i^2 \quad (1.9.15)$$

$$J_{zz} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 \quad (1.9.16)$$

Сравнивая с формулой элементов тензора вращения в системе центра масс (1.9.5), 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:

$$Q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{i,\alpha}^2 = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - J_{\alpha\alpha} \right) = R_g^2 - \frac{1}{N} J_{\alpha\alpha} \quad (1.9.17)$$

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

$$Q_{\alpha\beta} = -\frac{1}{N} J_{\alpha\beta}, \quad \alpha \neq \beta \quad (1.9.18)$$

Тогда матричный вид формулы тензора вращения (1.9.5) через тензор инерции (1.9.10) будет:

$$Q = R_g^2 * E - \frac{1}{N} J \quad (1.9.19)$$

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:

$$S^T Q S = R_g^2 * E - \frac{1}{N} * J_D \quad (1.9.20)$$

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.

1.9.4 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 [7]:

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

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 [7] определим среднюю асферичность (показатель, насколько блуждание отличается от круга):

$$\mathcal{A} = \left\langle \frac{(q_1 - q_2)^2}{(q_1 + q_2)^2} \right\rangle_N \quad (1.9.21)$$

1.9.5 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 r (точнее, отношением числа спинов по горизонтали (L) и по вертикали ($r \times L$)) и значением асферичности соответствующей решётки:

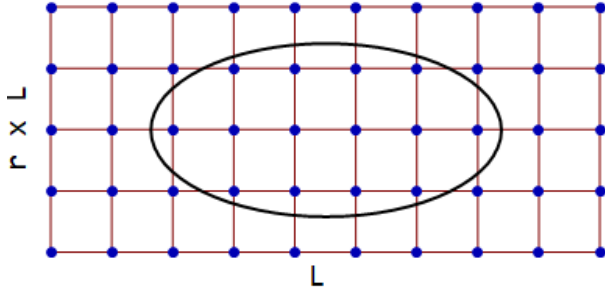


Рис. 1.6: Пример прямоугольной решётки со стороной $L = 10$ и отношением сторон $r = 0.5$ и её эллипс инерции, полуоси которого рассчитаны по формулам (1.9.22) и (1.9.23)

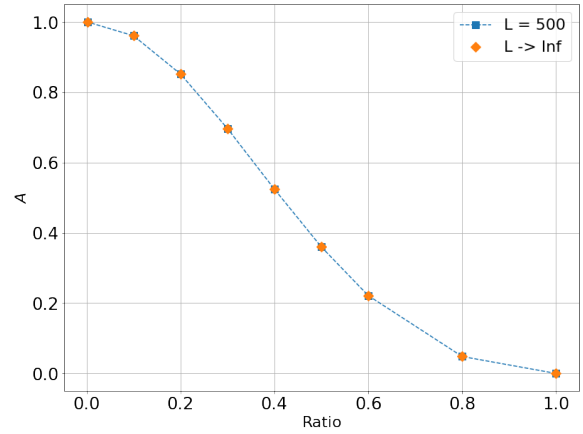


Рис. 1.7: График зависимости значения асферичности прямоугольной решётки длины 500 и в случае бесконечно большой длины от отношения сторон Ratio (или r)

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

$$i_x = \sqrt{\frac{J_{xx}}{N}} \quad (1.9.22)$$

$$i_y = \sqrt{\frac{J_{yy}}{N}} \quad (1.9.23)$$

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.

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 1.3: Таблица зависимости значения асферичности прямоугольной решётки от стороны L и отношения сторон r. Значения для длины 500 соответствуют значениям из графика 1.7

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 1.4: Таблица зависимости значения асферичности прямоугольной решётки бесконечно большой длины стороны L от отношения сторон r, отмеченная оранжевыми точками в графике 1.7 и рассчитанные по формуле (1.9.26)

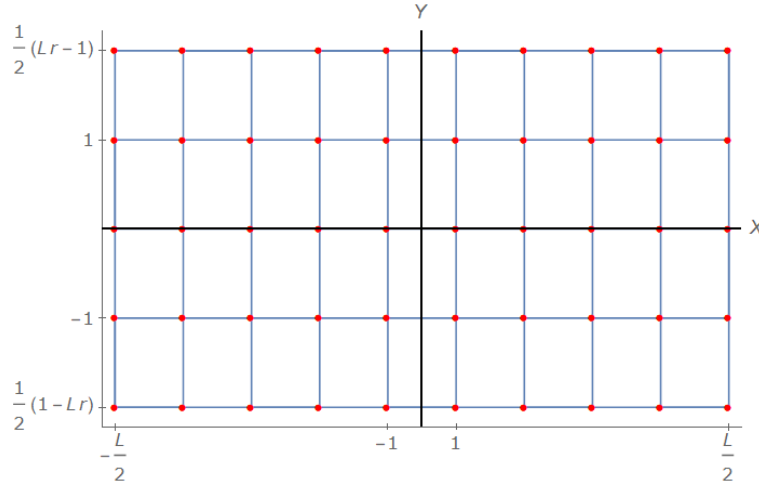


Рис. 1.8: Модель прямоугольной решётки для расчётов асферичности - она имеет четную и нечетную стороны, чтобы можно было рассмотреть всевозможные случаи

Рассмотрим зависимость получаемой асферичности прямоугольной решётки с нефиксированными отношением сторон r и стороной L, чтобы оценить шкалирование данной величины от L, заметное из таблицы 1.4. Для начала рассчитаем собственные значения тензора вращения.

В случае, когда сторона прямоугольной решётки четна (то есть, имеет чётное количество узлов), решётка 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 (1.9.5), 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 1.8 - q_{yy} из (1.9.5)):

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

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

$$q_{xx} = \frac{L^2 - 1}{12} \quad (1.9.24)$$

$$q_{yy} = \frac{(rL)^2 - 1}{12} \quad (1.9.25)$$

Перейдём непосредственно к расчёту асферичности по определению (1.9.21):

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

В итоге, получаем:

$$\mathcal{A} = \left(\frac{1 - r^2}{1 + r^2} \right)^2 + O\left[\frac{1}{L^2}\right] \quad (1.9.26)$$

1.9.6 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 \mathcal{A} (1.9.21) от константы взаимодействия J при длиннах $N = 1000, 2500, 3600, 4900$.

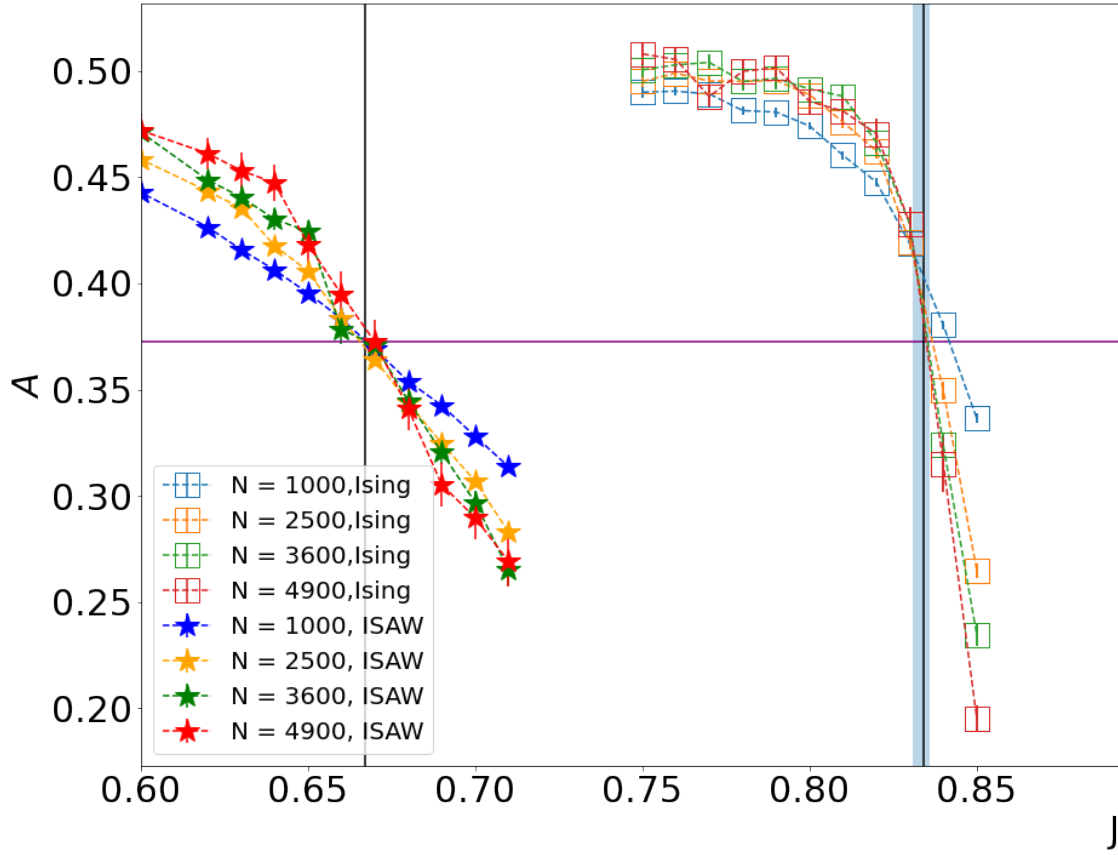


Рис. 1.9: График зависимости значения асферичности от константы взаимодействия для моделей взаимодействующего блуждания (слева) и Изинга на полимерной цепочке (справа)

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 ± 0.003 , или $T_c = 1/J_c = 1.199 \pm 0.003$ [9]), а черной сплошной - у модели ISAW (≈ 0.667 [7]). Горизонтальной линией отмечено значение асферичности в критической области модели ISAW из статьи Пелисsetто, равное $0.3726(7)$ ((4.10) [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.

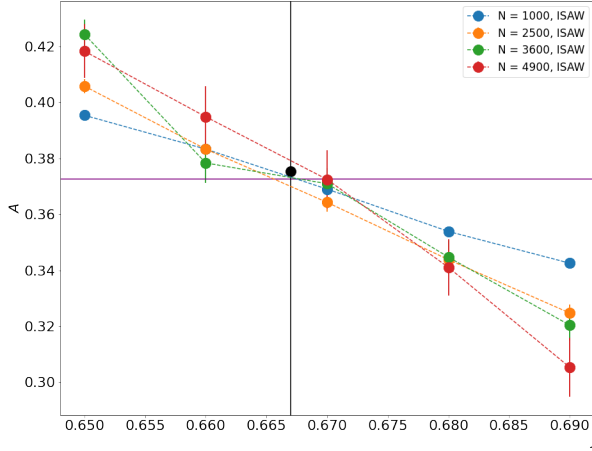


Рис. 1.10: График 1.9, увеличенный в масштабе в области фазового перехода модели взаимодействующих блужданий

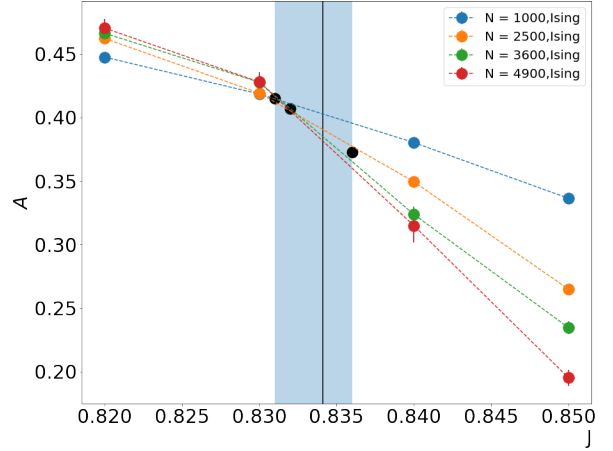


Рис. 1.11: График 1.9, увеличенный в масштабе в области фазового перехода Изинга на полимерной цепочке.

Чёрные точки на графиках 1.10-1.11 будут точками, для которых мы будем подбирать отношение сторон для модели прямоугольного Изинга по значению асферичности. Для модели Pollsing 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 ± 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 Pollsing $U_4 = 0.343 \pm 0.009$

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

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

Таблица 1.5: Таблица значений критических кумулянтов прямоугольной решётки в зависимости от асферичности моделей Pollsing и ISAW в областях крит. перехода и, следовательно, отношения сторон

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

1.10 Оценка работы алгоритма для трёхмерной модели Изинга

1.10.1 Расчёт магнитных свойств

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

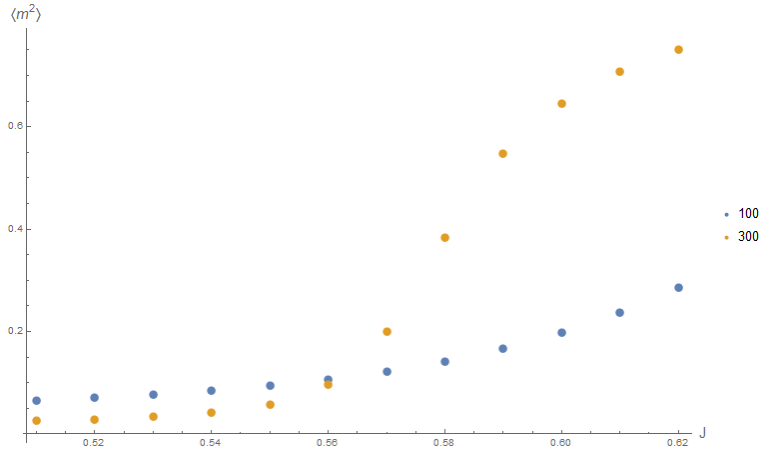


Рис. 1.12: График зависимости квадрата намагниченности от J

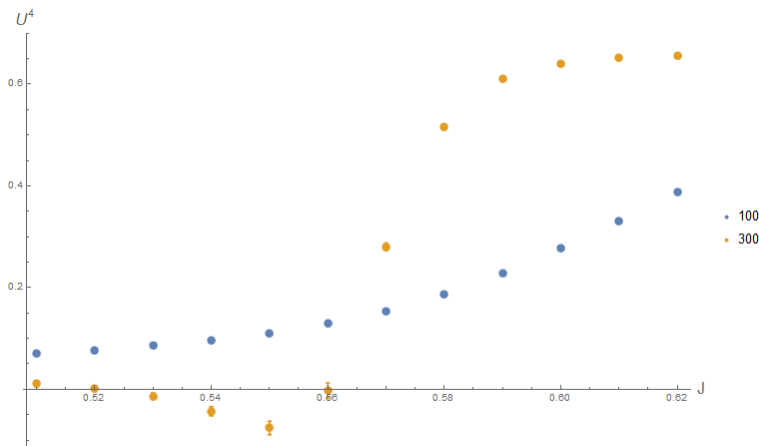


Рис. 1.13: График зависимости значения кумулянта Биндера от J

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

Глава 2

3 курс

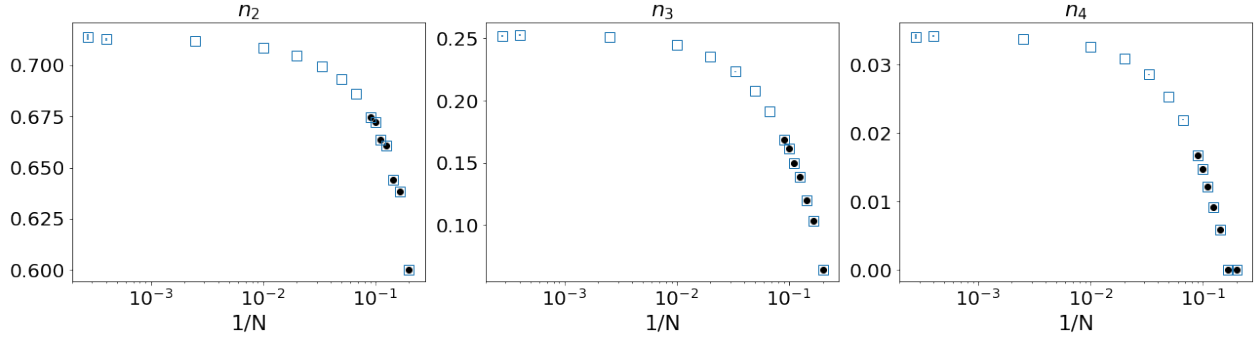


Рис. 2.2: Зависимостей средних долей узлов конформации с фиксированным числом соседей (от 2 до 4) модели ISAW при $J=0$ от обратной длины $1/N$ при длинах конформации $N=5-3600$. Пустые квадраты - результаты симуляций Монте-Карло, черные точки - расчёты полученные путём полного перебора возможных конформаций [2]

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

2.1.1 Введение

В данном разделе мы изучаем такое геометрическое свойство модели, как доли узлов с фиксированным числом соседей. У каждого узла можно определить число соседей или количество близких связей на смежных ячейках исследуемой решётки (см. левый рисунок 2.4). Рассмотрим пример конформации на квадратной решётке на рисунке 2.1. 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 2.2 - разные типы расчётов полностью совпали, что говорит о правильности используемого алгоритма.

2.1.2 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 2.3, а также опубликованы в работе [8].

На графиках 2.3 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 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.

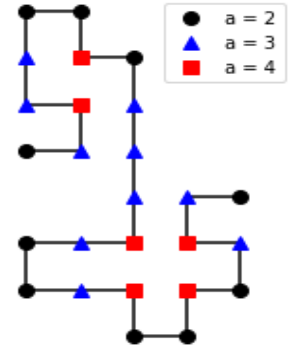


Рис. 2.1: Пример конформации на квадратной решётке с подсчётом соседей

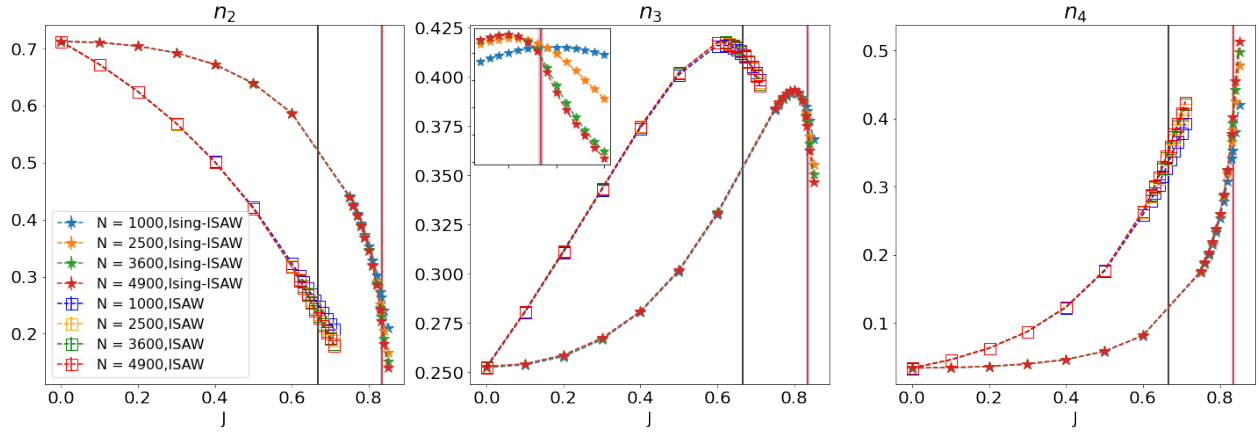


Рис. 2.3: Зависимость доли узлов конформации с двумя (слева), тремя (по центру) и четырьмя соседями (справа) у моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW на квадратной решётке от J . Черной линией обозначена точка фазового перехода модели ISAW, красной - Ising-ISAW, на квадратной решётке (см. таблицу 2.1). График взят из работы [8]

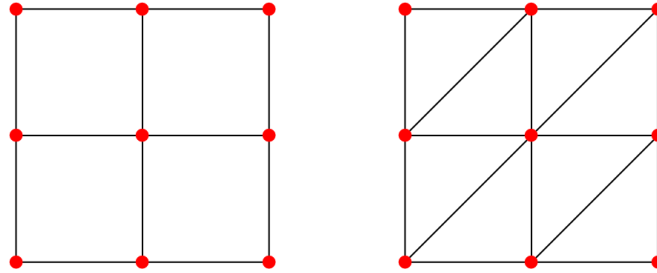


Рис. 2.4: Связи узлов в квадратной (слева) и треугольной решётках (справа)

2.1.3 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 2.4).

График зависимости долей от константы взаимодействия J (используется в гамильтониане конформации по формуле 1.1.3, 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 2.5 - слева показаны результаты симуляций Монте-Карло на кубической решётке, справа - на треугольной решётке. Цвета графиков соответствуют длинам цепочек - $N=100$ зелёные, 300 синие, 600 красные и 1200 фиолетовые. Число шагов симуляций - от 10^{10} вдали от пиков до 10^{12} в районе пиков графиков. Вертикальными линиями отмечены точки критического перехода:

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.

lattice	Ising-ISAW	ISAW
square	0.8340(5) [8]	0.6673(5) [7]
triangular	Unknown	0.41(7) [14]
cubic	0.5263 ± 0.055 [9]	0.2779 ± 0.0041 [17]

Таблица 2.1: Значения J критических точек фазового перехода модели Изинга на случайном блуждании (Ising-ISAW) и гомополимера (ISAW) на квадратной, треугольной и кубической решётке соответственно (в порядке строк)

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 2.5 звездочками. Стоит отметить, что при прохождении точки перехода в кубической решётке, графики долей узлов с любым числом соседей словно претерпевают скачок, усиливающийся с ростом длины цепочки, в отличие от треугольной решётки, где процесс непрерывен.

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

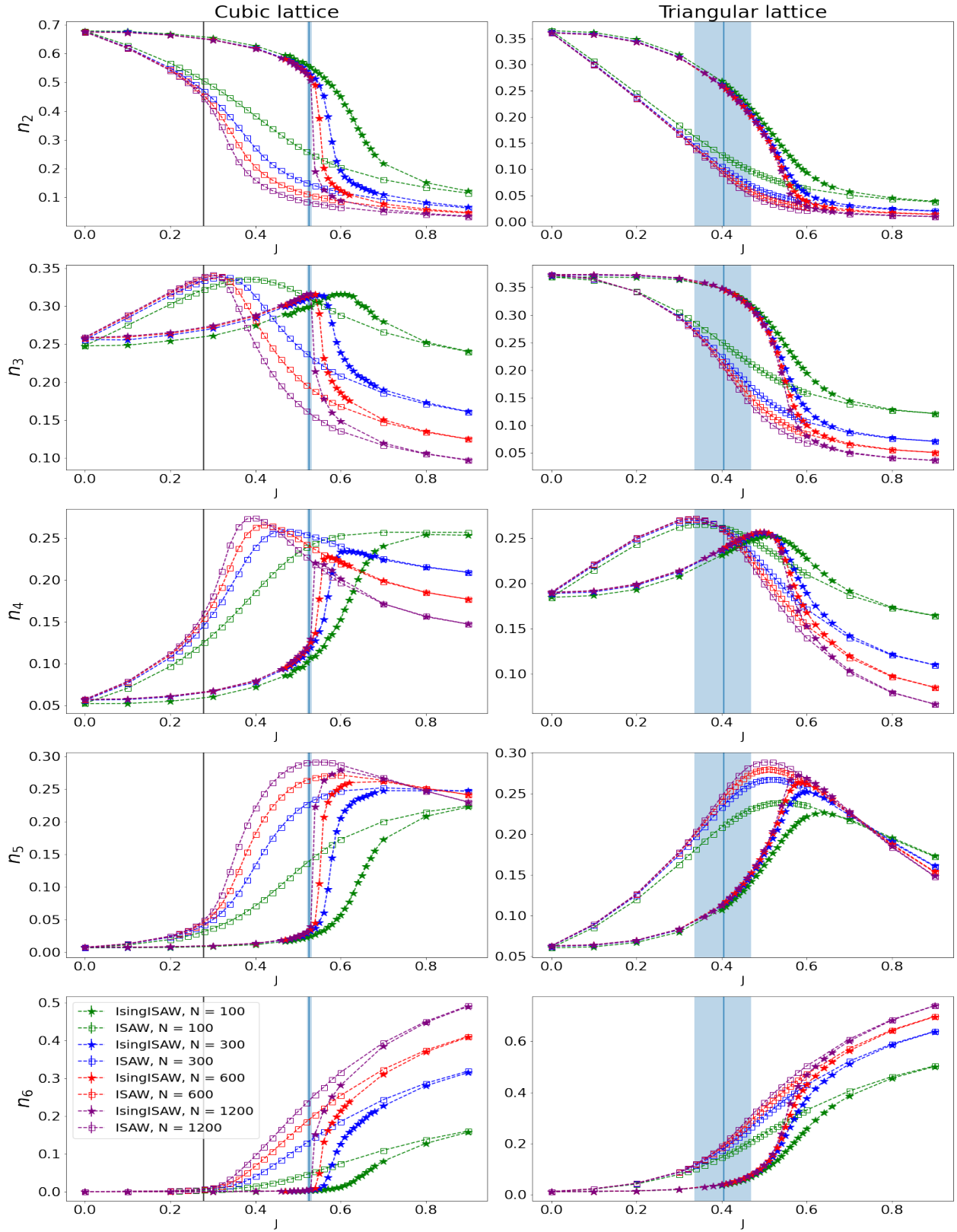


Рис. 2.5: Зависимость доли узлов моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW (квадраты) на кубической (слева) и треугольной решётках (справа) с 2-6 соседями (сверху вниз) от J с длинами $N = 100$ (зеленые), 300 (красные), 600 (синие) и 1200 (фиолетовые). Вертикальные линии отмечают точки фазового перехода моделей 2.1

2.1.4 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

$$y = ax + b \quad (2.1.1)$$

2. Лог-линейная или экспоненциальная аппроксимация

$$y = b \exp(ax) + c \quad (2.1.2)$$

3. Степенная или лог-лог аппроксимация

$$y = bx^a + c \quad (2.1.3)$$

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 2.6 и 2.7 - 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 2.6 и 2.7 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 2.2: Значения и погрешности коэффициентов линейного фитирования (2.1.1) 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 2.2 показывают, что наиболее оптимальный фит (с наименьшей ошибкой) достигается при выборе точек от 250 до 4900. Это можно объяснить тем, что при выборе точек большего диапазона линейный характер будет выражен слабее, а при выборе точек меньшего диапазона количество рассматриваемых данных уменьшается, что приводит к росту ошибки (недостаточно статистики). Подобная операция была выполнена и для других чисел соседей и решёток (более подробные графики см. в `Bulk2-6.ipynb` в разделе "Расчёты `.ipynb`" [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 (2.1.1) без графиков.

Результаты линейного фитирования при выборе разной наименьшей рассматриваемой длины можно увидеть на таблицах 2.3 и 2.4. 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.

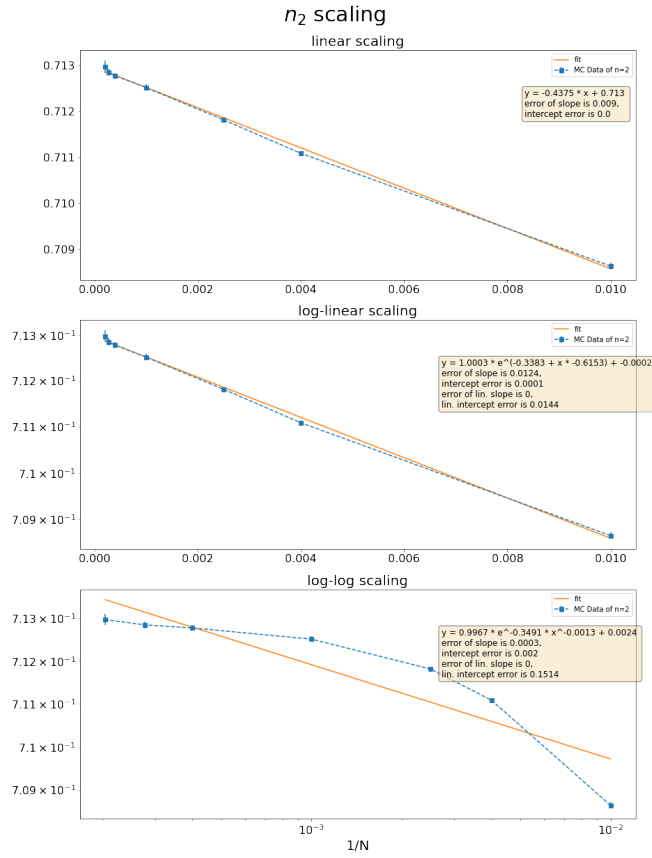


Рис. 2.6: Результаты аппроксимации (оранжевая линия) данных Монте-Карло о долях узлов с двумя соседями n_2 модели Ising-ISAW на квадратной решётке (синие точки) различными способами на диапазоне длин 100-4900

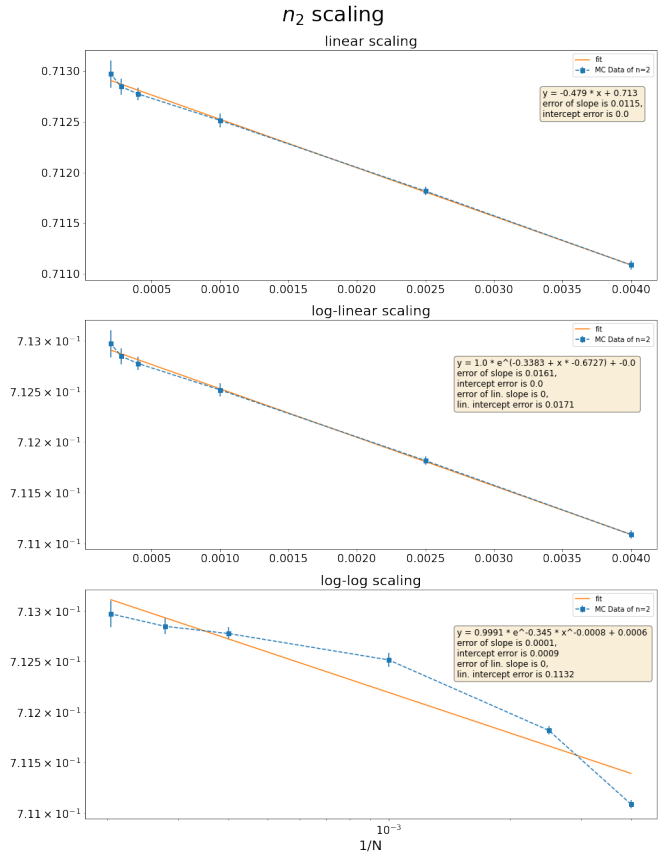


Рис. 2.7: Результаты аппроксимации (оранжевая линия) данных Монте-Карло о долях узлов с двумя соседями n_2 модели Ising-ISAW на квадратной решётке (синие точки) различными способами на диапазоне длин 250-4900

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).

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

На графике 2.8 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 2.3: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (2.1.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 2.8 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 2.4: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (2.1.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 2.8 для длин N от 250 до 4900 (для квадратной) и от 200 до 1200 (для остальных решёток)

Lattice	$\langle n_2 \rangle$			$\langle n_3 \rangle$			$\langle n_4 \rangle$		
	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 2.5: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (2.1.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 2.8 - наилучшие приближения с подбором диапазона длин для каждого графика (в столбце N)

Из таблицы 2.5 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 (2.1.1) почти не наблюдается - они имеют как разные значения свободных членов, так и значения и даже (в случае 2-х соседей) знаки коэффициента наклона, разница которых значительно превышает погрешность фита.

Значение свободного члена b для $\langle n_2 \rangle$, то есть предела значения долей при бесконечной длине цепочки, у квадратной и треугольной решётки (первый блок первых двух строк таблицы 2.5) отличается почти в два раза: 0.71299(2) и 0.35989(1) (что логично, ведь в треугольной решётке диагональные ячейки так же считаются соседними, поэтому половина поворотов конформации добавит соседей).

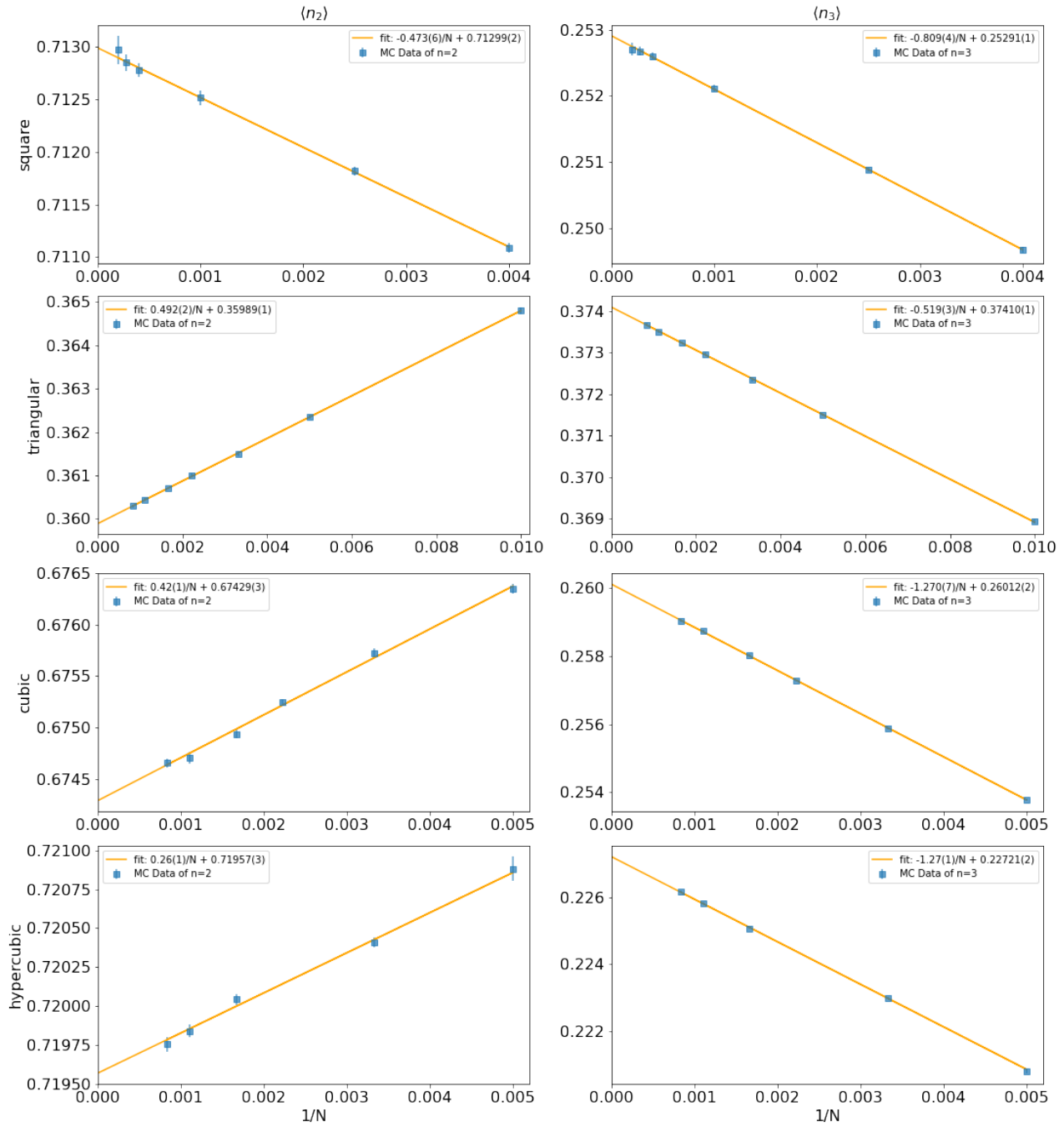


Рис. 2.8: Зависимость средней доли узлов с 2-мя соседями (слева) и 3-мя (справа) от обратной длины $1/N$ в модели Изинга на случайном блуждании на квадратной, треугольной, кубической и гиперкубической (сверху вниз). Синие точки описывают результаты симуляций Монте-Карло, оранжевая линия - график линейной аппроксимации результатов, ошибки рассчитаны с учётом погрешностей полученных данных. Коэффициенты и диапазоны длин рассматриваемых данных записаны в таблице 2.5

	$\langle n_5 \rangle$			$\langle n_6 \rangle$		
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 2.6: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (2.1.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 5-6 соседями

	$\langle n_7 \rangle$			$\langle n_8 \rangle$		
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 2.7: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (2.1.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 7-8 соседями

2.1.6 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 (2.1.1) отображены в таблицах 2.5 и 2.6: 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 2.7, поэтому мы рассматриваем число соседей лишь от 2 до 6.

Рассматривая средние строки таблицы 2.5, где записаны коэффициенты прямых фитирования для n_2 и n_3 треугольной и кубической решётки соответственно, а так же средние графики на рисунке 2.8, мы видим примерно ту же ситуацию как и в случае сравнения треугольной с квадратной - кубическая решётка на графике 2.8 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 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 (2.1.1) для долей узлов с 3-мя соседями $\langle n_3 \rangle$ у кубической и гиперкубической решёток (см. таблицу 2.5).

2.1.7 Обобщение до случайных блужданий с самопересечениями

В качестве завершения исследования поведения долей узлов с фиксированным числом соседей рассмотрим случай базового случайного блуждания, в которой отсутствует ограничение самопересечений. Они легко генерируются в виде последовательности индексов направлений a_N в любой решётке, что ускоряет процесс моделирования. Тогда, начиная с некоторой начальной точки на решётке ω_0 , блуждание определяется как последовательность узлов $\omega_i = \omega_{i-1} + steps[a_i]$, где $steps$ - массив фиксированных смещений из точки, определяемые законами решётки. Точность подсчёта наблюдаемых определяется лишь количеством повторов эксперимента.

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

концы которых будут узлами с всего одним соседом - основанием "шипа".

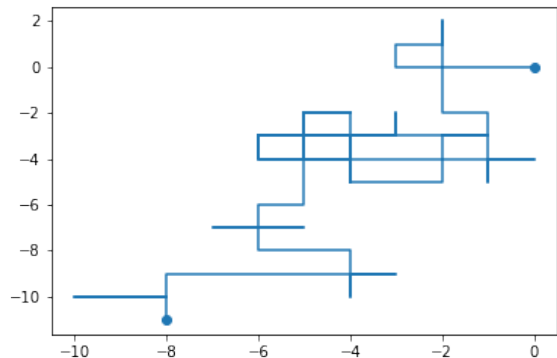


Рис. 2.9: Пример сгенерированного блуждания Random-Walk

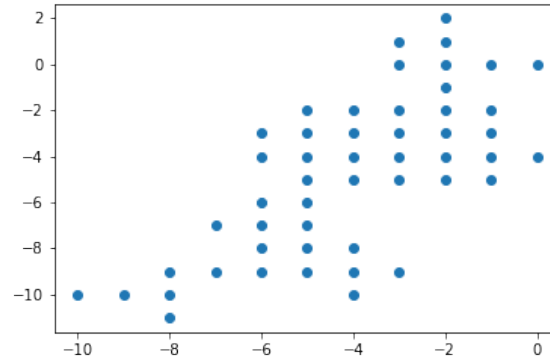


Рис. 2.10: Набор уникальных точек, принадлежащих блужданию Random-Walk

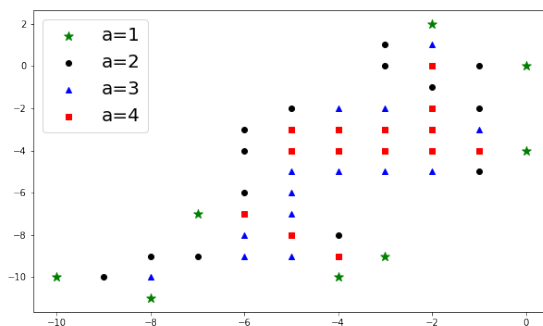


Рис. 2.11: Пример подсчёта соседей у каждого узла блуждания

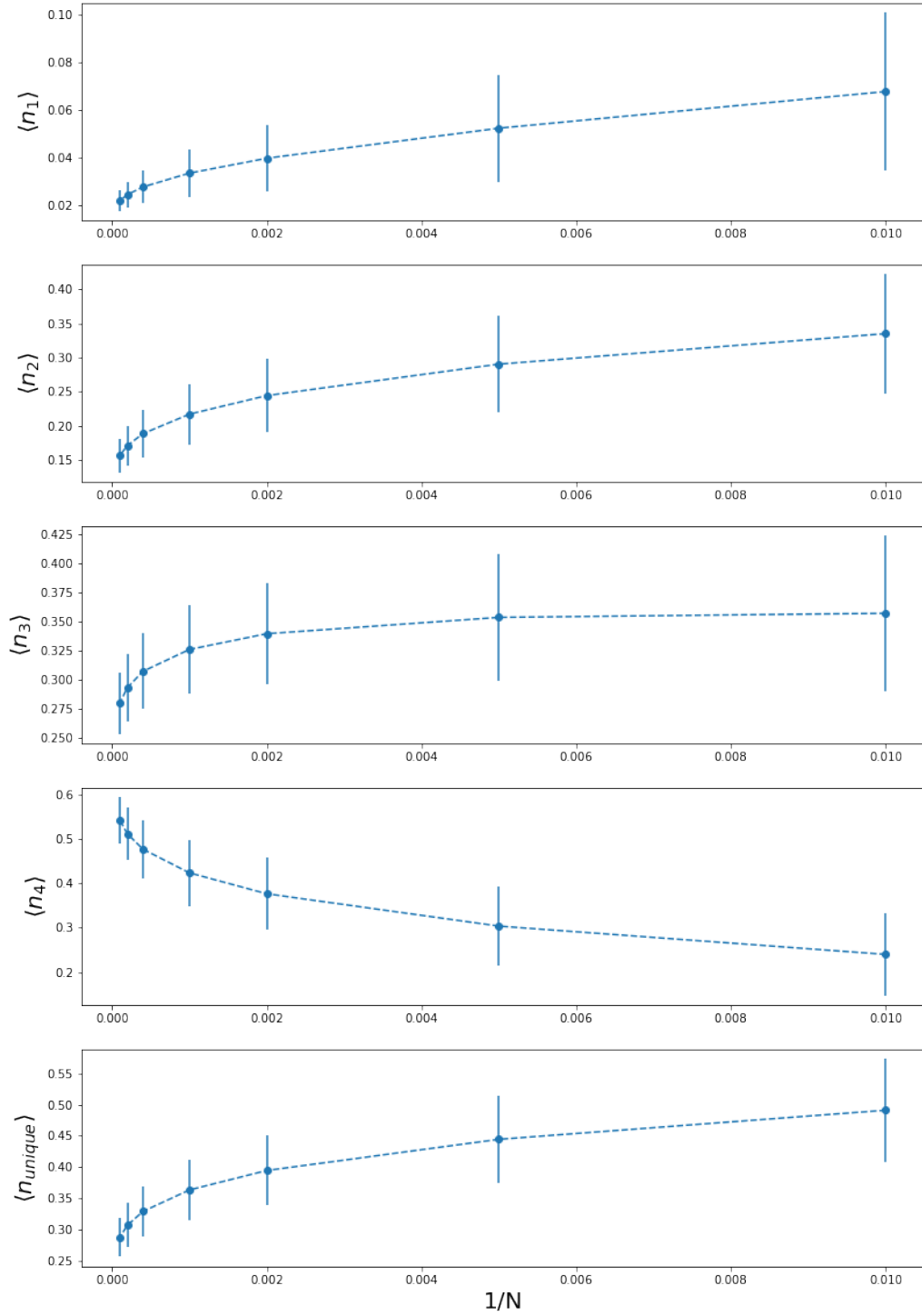
Алгоритм обработки каждого модерируемого блуждания описан на картинках 2.9, 2.10 и 2.11:

- Из случайного блуждания отбираются все уникальные точки узлов
- Для каждого уникального узла рассчитывается кол-во его соседей
- Доля узлов с k соседями считается как количество уникальных узлов с k соседями/общее кол-во уникальных узлов

Была проведена генерация модели случайного блуждания с самопересечениями (далее Random-Walk) для длин $10^2 - 10^4$. Рассматривалась доля узлов с фиксированным числом соседей - от 1 до 4 - среди уникальных узлов в итоговой конформации, для чистоты результатов и возможности сравнения с результатами случайного блуждания без самопересечений. Доли уникальных узлов так же бралась во внимание при симуляциях. Результаты симуляций, а так же количество итераций для каждой длины, описаны в таблице 2.8 и изображены на графике 2.12¹.

¹Процесс симуляций был запрограммирован на языке Python и проводился с использованием суперкомпьютера НИУ ВШЭ. Оптимизация требовала дополнительного изменения окружения - см. технический раздел 3.2.1

Рис. 2.12: Зависимость долей узлов с фиксированным число соседей в случайном блуждании от обратного кол-ва шагов в конфигурации $1/N$



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

Таблица 2.8: Средние доли узлов с 1-4-мя соседями в конформациях модели Random-Walk длин $10^2 - 10^4$

Погрешности результатов

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

Распределение наблюдаемых долей узлов с фиксированным числом соседей 1-4, а так же доли уникальных узлов рассмотрены на гистограммах на левом графике рисунка 2.13 в двух моментах времени: после 10^6 шагов и после $2.5 * 10^6$ шагов. На рисунке видно, что данные всех величин имеют нормальное или близко к нормальному распределению, а несимметричные склоны некоторых величин (n_1 и n_2) объясняются близостью соответствующего края к нулю.

Сходимость наблюдаемых величин можно увидеть на правом графике 2.13, где замеры средних проводились через каждые 4000 шагов. На графике средних заметна сходимость средней величины и уменьшение колебаний. С другой стороны, график среднего квадратического отклонения не стремится к нулю как ожидалось, а так же сходится с уменьшением колебаний к ненулевому значению. Это показывает противоречивость результатов (по крайней мере замеров ошибки - среднее явно сходится), причину чему следует искать в коде.

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

2.1.8 Число соседей в атмосферах Преллберга

В статье [13] в пространстве невзаимодействующих случайных блужданий без самопересечений было рассмотрено так 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.

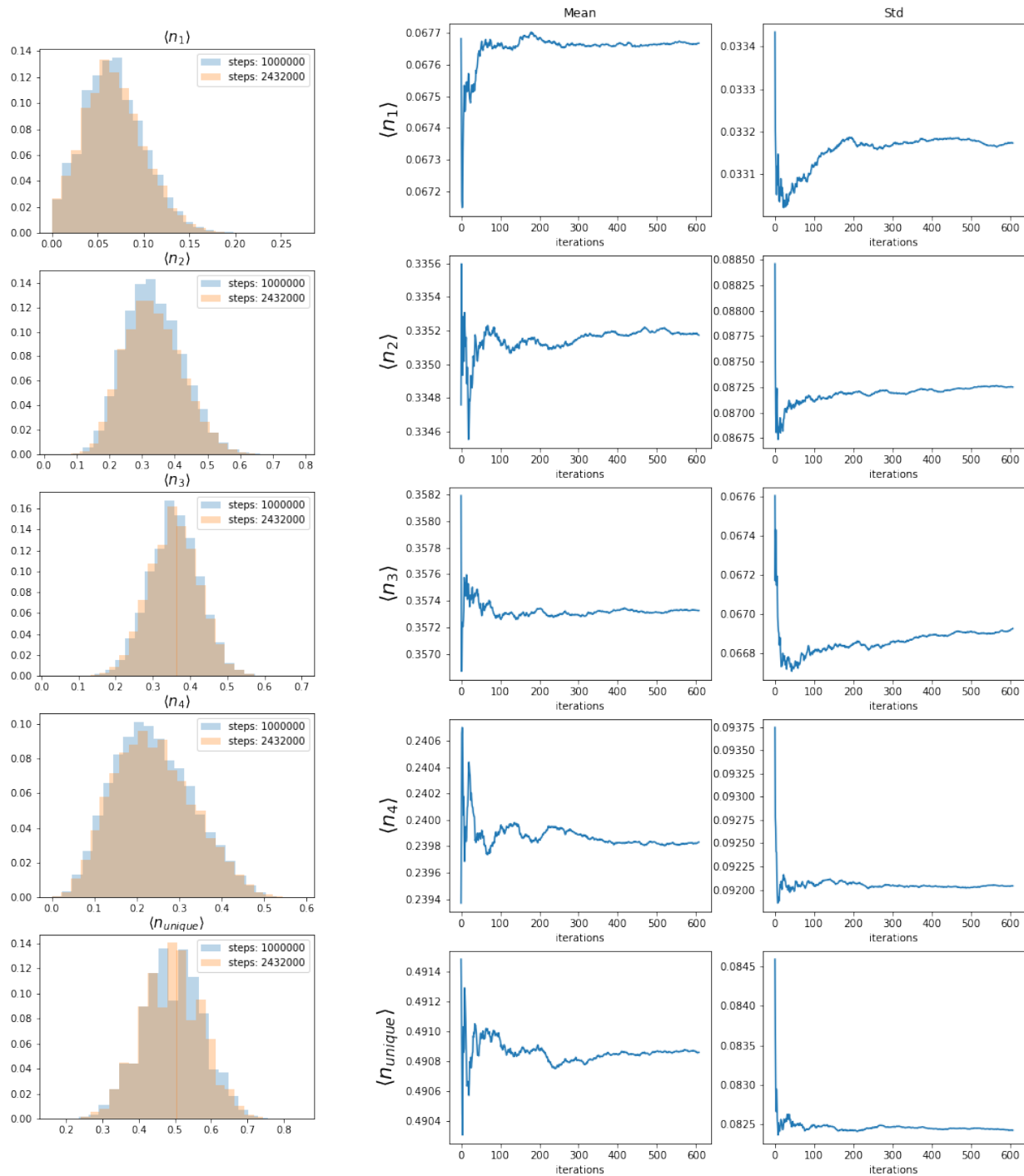
Рассмотрим верхний рисунок 2.14: если конец цепочки длины N (назовём его "N-ым узлом") имеет атмосферу три (три оранжевые точки вокруг правого конца), то при добавлении нового $N+1$ -го узла N-й будет иметь два соседа: N-1-й и N+1-й узлы (бывший правый конец стал черной точкой).

Так же при атмосфере 2 - как на среднем рисунке 2.14 - 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 2.14) 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 2.14. Очевидно, что случай удлинения при атмосфере 0 рассмотреть невозможно, и провести аналогию с соседями нельзя.

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

Рис. 2.13: Слева: Распределение долей узлов с 1-4 соседями и уникальных узлов блуждания длины 100 в два момента времени. Справа: История результатов (Столбец mean - средняя величина, столбец std - значение ошибки на i-м замере) долей узлов с 1-4 соседями и уникальных узлов блуждания длины 100 с интервалом замеров в 4000 шагов



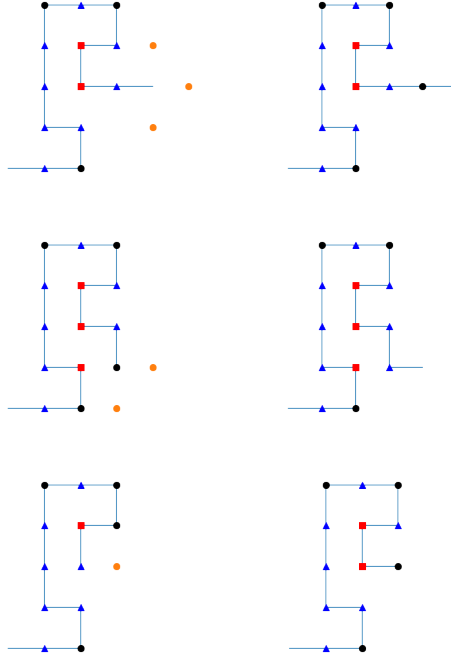


Рис. 2.14: Пример удлинения цепочки на квадратной решётке с атмосферой 3,2,1 (сверху вниз): слева изображена конформация до удлинения, справа - после, возможные способы добавить новый узел отмечены оранжевым, разметка узлов по количеству соседей соответствует рисунку 2.1

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 2.14) 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 не взаимодействующего 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 2.9: 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 2.9 слева изображены значения свободных членов графика зависимости вероятности гомополимерной цепочки иметь атмосферу k в статье [13], 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 [5]: 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 2.10: Вероятности у конформации иметь k-ю атмосферу (слева) и долей мономеров с i соседями (справа) в пределе бесконечной длины в случае гарантированно возможного удлинения

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

2.1.9 Атмосферы Преллберга в возвратных случайных блужданиях

Подобная атмосферам Преллберга задача рассматривалась в книге [18], на странице 206 под номером 9, но не для случайных блужданий без самопересечений, а некоторой модификации простого случайного блуждания - *возвратного*. Задача формулируется следующим образом:

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

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

Так же в качестве подсказки было указано, что отношение $p_1 : p_2 : p_3 : p_4$ почти равно $4 : 3 : 2 : 1$.

Действительно, сформулированная задача похожа на определение атмосфер Преллберга: в обоих случаях рассматривается конец пусть и разных по свойствам, но блужданий. Более того, в отличие от числа соседей все события имеют явную связь с атмосферами: при n посещённых перед остановкой блуждания соседних точек, не посещёнными будут 4-n точек, и можно сказать, что это соответствует атмосфере 4-n блуждания без самопересечений. То есть, можно выдвинуть предположение, что $p_n = p^{(4-n)}$

Однако проблема в том, что для простого случайного блуждания на квадратной решётке любой длины атмосфера всегда будет равна 4, так как блуждание, описанное в задаче, может идти по посещённым ранее точкам. Из этого следует основная причина, почему результаты Преллберга на таблице 2.9 не имеют подобного отношения, из чего следует логичный вывод, что число непосещённых точек посещённых точек вокруг конца простого случайного блуждания не соответствует атмосфере Преллберга для блуждания без самопересечений.

Глава 3

Приложение

3.1 Литературный обзор

С целью поиска информации о локальном координационном числе (что в случае блужданий может также быть названо числом соседей узла), был проведён обзор литературы, возможно имеющей отношение к рассматриваемым в рамках проекта моделям.

3.1.1 Livne, Meirovich: Polymers Adsorbed on a surface

Особенности модели блуждания

В работе [10] исследуется поведение адсорбирующего случайного блуждания без самопересечений на кубической решётке со следующими особенностями симуляции

- Случайное блуждание длины $N+1$ строится пошагово ($N+1$ мономеров в цепочке или N шагов), из начала координат ($x=0, y=0, z=0$) с ограничением на верхнее полупространство (то есть, $z \geq 0$ и плоскость $z=0$ имеет открытые граничные условия).
- Энергия конформации считается как число мономеров, лежащих на поверхности (у которых $z_i = 0$), умноженное на константу взаимодействия полимера и поверхности ϵ
- Вероятность i -й конформации считается последовательно: вводится новая статсумма, суммирующая для заданного направления текущей недостроенной цепочки всевозможные хвосты остаточной длины (10) [10].

Подробнее о статсумме и методе Сканирования

В данном подразделе вольным образом объясняется действие статсуммы, созданное методом сканирования. Так как при симуляции строится новое блуждание "с нуля" требуется оценка вероятности как каждого шага (точнее, направления v_k) так и всего блуждания.

Поэтому для k -го шага вероятность рассчитывается следующим образом:

1. Считается статсумма куска будущего блуждания из b ($\leq N - k + 1$) шагов, начинающая с направления v на высоте z_{k-1} :

$$Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) = \sum_j \exp(-\epsilon m_j(0)/k_b T) \quad (3.1.1)$$

2. Затем проводится расчёт вероятности выбрать направление v из всех возможных на k -м шаге:

$$p_k(v|b, z_{k-1}, v_{k-1}) = Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) / \sum_v Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) \quad (3.1.2)$$

3. Итоговой вероятностью всего построения будет произведение всех вероятностей каждого шага по выбранным направлениям:

$$P_i(b) = \prod_{k=1}^N p_k(v_k|b, z_{k-1}, v_{k-1}) \quad (3.1.3)$$

Результаты работы

Основными итогами работы являлось подтверждение эффективности метода "сканирования" для работы с длинными цепочками в модели адсорбирующего блуждания, определено критическое шкалирование перпендикулярного радиуса инерции (радиуса инерции проекции блуждания на ось z), а также профиля мономерной концентрации $p(z)$ (средняя доля узлов конформации длины $N+1$ на фиксированной высоте z от поверхности).

Информации о локальном координационном числе в статье найдено не было.

3.1.2 Madras, Sokal: The Pivot Algorithm

Работа [11] повествует о работе и эффективности алгоритма Пивота в изучении модели случайного блуждания без самопересечений (СБС).

Основные принципы алгоритма

Каждый шаг алгоритма проводит следующие действия над уже сгенерированной цепочкой длины $N+1$:

- Случайно выбирается с равномерным распределением для рассматриваемых узлов $p_k = 1/N$ k -й узел цепочки ($0 \leq k \leq N - 1$, хотя начальную точку $k=0$ на практике не используют)
- Последующую половину цепочки ($\omega_{k+1}, \omega_{k+2}, \dots, \omega_N$ заменяют элементов группы симметрии (проще говоря, отражают, поворачивают или проводят комбинацию этих действий)
- В случае, если полученная операцией цепочка осталась без самопересечений, шаг принимается - в противном случае, шаг производится заново

В статье так же была доказана эргодичность алгоритма, а так же средние вероятности принятия каждого из возможных преобразований.

Для симуляций в качестве стартовой позиции использовалось два варианта: прямые цепочки "rods", при которых проходило некоторое кол-во шагов до достижения термального равновесия системы (в таком состоянии процесс из следующих состояний цепочки становится близким по распределению к стационарному стохастическому), или же "димеризованные цепочки", состояние которых уже считается равновесным. Вторым методом становится крайне времязатратным при большой длине цепочки, поэтому при $N \geq 2400$ чаще применялась термализация прямых цепочек.

Пристальное внимание в статье было обращено к среднему радиусу инерции S_N^2 и квадрату расстояния между концами ω_N^2 , а так же к оценке метрической экспоненты ν , характеризующей обе величины в крит. области модели:

$$\begin{aligned}\langle \omega_N^2 \rangle &\sim N^{2\nu} \\ \langle S_N^2 \rangle &\sim N^{2\nu}\end{aligned}$$

В оценке будущей работы было так же отмечено, что алгоритм Пивота не подходит для расчёта связующей μ и критической γ экспонент (связующую константу так же называют *эффективным координационным числом*), так как алгоритм работает лишь в случае канонического ансамбля (при фиксированной длине цепочки) и требуется алгоритм, работающий уже в большом каноническом ансамбле (с цепочками изменяемой длины).

В статье не рассматривалось как таковое "число соседей узлов".

3.1.3 Спицер, Основные принципы случайного блуждания, глава 3

3.2 Программно-техническое приложение

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

3.2.1 Применение jit-компиляции при программировании на языке Python

Симуляции случайного блуждания с самопересечениями (для кода см. папку *Random_Walk* [1]) были запрограммированные на языке Python с компиляцией с помощью пакета numba метод jit. В качестве окружения была использована стандартная библиотека *Python/Anaconda_v11.2021* встроенная в стандартное ПО суперкомпьютера.

Выполнение первых экспериментов по симуляциям шло крайне медленно - результаты за семь дней можно увидеть на таблице 3.1

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

Таблица 3.1: Средние доли узлов с 1-4-мя соседями в конформациях модели Random-Walk длин $10^2 - 10^4$

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



Решением проблемы оказалось создание собственного окружения с другими версиями используемых пакетов numru и numba (полный список так же есть в репозитории с кодом [1]). Новые результаты за 7 дней описаны в продолжении основного раздела.

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

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

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

Подробнее об определении какая библиотека линейной алгебры используется в пакете numru можно найти здесь.

Литература

- [1] Github repository: Chpel/projectmagnet.
- [2] Github repository: kamilla0503/saw.
- [3] Github repository: kamilla0503/saws.
- [4] Github repository: Shroedingercat/self-learning-monte-carlo-algorithm.
- [5] Prellberg private communication 2021.
- [6] 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.
- [7] Sergio Caracciolo, Marco Gherardi, Mauro Papinutto, and Andrea Pelissetto. Geometrical properties of two-dimensional interacting self-avoiding walks at the θ -point. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44(11):115004, 2011.
- [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] Shelly Livne and Hagai Meirovitch. Computer simulation of long polymers adsorbed on a surface. i. corrections to scaling in an ideal chain. *The Journal of Chemical Physics*, 88(7):4498–4506, 1988.
- [11] Neal Madras and Alan D Sokal. The pivot algorithm: a highly efficient monte carlo method for the self-avoiding walk. *Journal of Statistical Physics*, 50(1):109–186, 1988.
- [12] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, Oxford, 1999.
- [13] AL Owczarek and Thomas Prellberg. Scaling of the atmosphere of self-avoiding walks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 41(37):375004, 2008.
- [14] V Privman. Study of the θ 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] Robert Swendsen. *An introduction to statistical mechanics and thermodynamics*. Oxford University Press, USA, 2020.
- [17] 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.
- [18] Ф Спидер. *Принципы случайного блуждания*. М.: Мир, 1969.