

# Проект №19455 "Решетчатые модели макромолекул"

Пчелинцев Илья Игоревич, БПМ-192

## Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Модели и методы</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Модель Изинга на прямоугольной решётке</b>	<b>6</b>
3.1	Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга . . . . .	6
3.2	Сравнение модели Изинга и модели взаимодействующих непересекающихся блужданий . . . . .	6
3.3	Связь тензора инерции и тензора вращения . . . . .	9
3.4	Показатели формы блуждания из тензора вращения . . . . .	11
3.5	Асферичность прямоугольных решёток . . . . .	11
3.6	Свойства моделей вблизи фазового перехода с учётом показателей формы . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Геометрические свойства модели Ising-ISAW с точки зрения числа соседей в узлах</b>	<b>17</b>
4.1	Введение . . . . .	17
4.2	Особенности ранних результатов на квадратной решётке . . . . .	17
4.3	Сравнение модели Изинга и полимерной цепочки в решетках с 2-6 возможными соседями мономеров .	18
4.4	Алгоритм исследования характера зависимости значения долей узлов от длины при $J=0$ . . . . .	21
4.5	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на треугольной решётке с квадратной в $J=0$ . . . .	23
4.6	Сравнение геометрических свойств модели Изинга на решётках с большим числом соседей в $J=0$ . . .	25
4.7	Обобщение до случайных блужданий с самопересечениями . . . . .	26
4.7.1	Погрешности результатов . . . . .	27
4.8	Число соседей в атмосферах Преллберга . . . . .	29
4.9	Задача Спитцера и применение к ранним результатам . . . . .	32
4.10	Планируемая деятельность . . . . .	33
<b>5</b>	<b>Литературный обзор</b>	<b>35</b>
5.1	Livne, Meirovich: Polymers Adsorbed on a surface . . . . .	35
5.1.1	Особенности модели блуждания . . . . .	35
5.1.2	Подробнее о статсумме и методе Сканирования . . . . .	35
5.1.3	Результаты работы . . . . .	36

5.2	Madras, Sokal: The Pivot Algorithm . . . . .	37
5.2.1	Основные принципы алгоритма . . . . .	37
5.3	Спицер: Теория случайных блужданий . . . . .	37
<b>6</b>	<b>Программно-техническое приложение</b>	<b>39</b>
6.1	Применение jit-компиляции при программировании на языке Python . . . . .	39
6.2	Итерации программного комплекса Rand-Walk . . . . .	40

# 1 Введение

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

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

В предыдущей работе [8] было определено, что фазовый переход двумерной модели Изинга на СБС имеет непрерывный характер. В этой работе мы продолжаем изучать геометрические свойства данной модели и сравнивать их с её родительскими моделями или модификациями, такими как классическая модель Изинга на регулярной решётке, определённая в работе [14], и взаимодействующее случайное блуждание без самопересечений в соответствующих критических областях. Мы предполагаем, что модели с похожими геометрическими свойствами будут так же иметь схожесть в магнитных, что мы рассмотрим при сравнении кумулянтов биндера в области  $\theta$ -перехода моделей при равных значениях асферичности. Также могут быть интересны для рассмотрения решётки, на которых исследуются конформации модели, как параметр задающий закон, по которому определяется близость узлов и следовательно - существование тех или иных связей между ними в цепочке. Данное направление было начато в частном случае среди концов случайных блужданий без самопересечений на квадратной решётке в работе [12]. В нашей работе мы рассмотрим эти результаты с долей узлов с фиксированным количеством соседей на квадратной решётке, как обобщение на внутренние узлы цепочки, а так же рассмотрим поведение данного геометрического свойства среди разных решёток в пределе бесконечной длины цепочки.

## 2 Модели и методы

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

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

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

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

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

Под "родительскими" к Ising-ISAW моделями определим следующие две: с одной стороны, взаимодействующая составляющая модели берётся из классических моделей Изинга - в частности, мы будем рассматривать классическую модель Изинга на регулярной прямоугольной решётке (далее - прямоугольный Изинг), определенную так же в работе [14]. В ней узлы со спинами заполняют всю решётку со стороной  $L = N_x$  и отношением сторон  $r = \frac{N_y}{N_x}$ . Длина стороны считается как количество узлов решётки в одном ряде. Решётка может иметь как периодические граничные условия - когда узлы на противоположных краях решётки считаются соседними - так Тогда энергия системы с последовательностью спинов  $s$ , рассчитывается как сумма взаимодействий между ближайшими узлами по всей решётке:

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

Статическая сумма модели берётся только возможным последовательностям  $s$ :

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

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

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

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

С другой стороны, определим модель взаимодействующего блуждания без самопересечений (далее - ISAW) на квадратной решётке из работы [7]. В отличие от Ising-ISAW, узлы конформации не имеют спинов, и энергия модели рассчитывается как сумма связей переменной силы  $J$  между узлами:

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

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

В рамках работы [7] исследовалось поведение геометрических свойств в критической области - в частности, асферичности конформации, показателя отличия системы узлов от круга. Для этого определим показатели формы системы, такие как тензор вращения системы - матрица корреляции координат системы из  $N$  точек  $w_i = (w_{i,\alpha}, w_{i,\beta})$ :

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

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

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{(N+1)} \sum_{i=0}^N w_{i,\alpha} w_{i,\beta} \quad (2.9)$$

$$\sum_{i=0}^N w_i = 0 \quad (2.10)$$

Собственные значения  $q_1, q_2$

### 3 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

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

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

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3(\langle m^2 \rangle)^2} \quad (3.1)$$

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

Для сравнения значения кумулянтов модели прямоугольного Изинга с разными размерами, но одинаковым отношением сторон (так же Aspect Ratio или  $r$ ), так, что число спинов составляет  $L \times rL$  были проведены симуляции модели на основе алгоритма из проектной работы Сорокина Никиты [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  $2 \times 10^6$  итераций. Все расчёты проводились в критической точке [14]:

$$J = \frac{1}{2.26918...} \quad (3.2)$$

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 снизу) и периодических (рис. 1 сверху) значения кумулянта стремятся к нулю с увеличением длины цепочки(см. Проект6.pdf [1]). Черными точками отмечены значения критического кумулянта из работы Волтера Сельке [14]:

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

Таблица 1: Таблица значений критических кумулянтов для прямоугольных решёток из статьи У. Сельке [14]

Эти же значения отмечены в графиках 2 и 3 зависимости крит. кумулянта от обратной длины стороны как крайние левые (в нуле - так обозначен случай термодинамического предела).

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

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

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

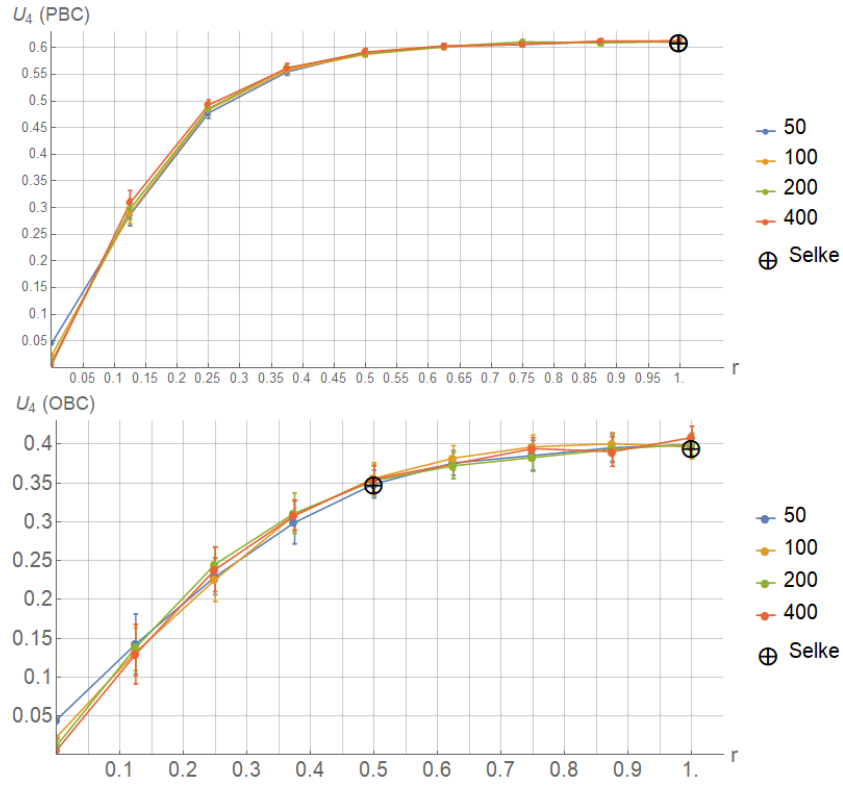


Рис. 1: График зависимости значения кумулянта Биндера (3.1) в крит. точке (3.2) от Aspect Ratio при открытых (снизу) и периодических гран. условиях (сверху). Черные точки - значения критических кумулянтов из работы W. Selke [14]

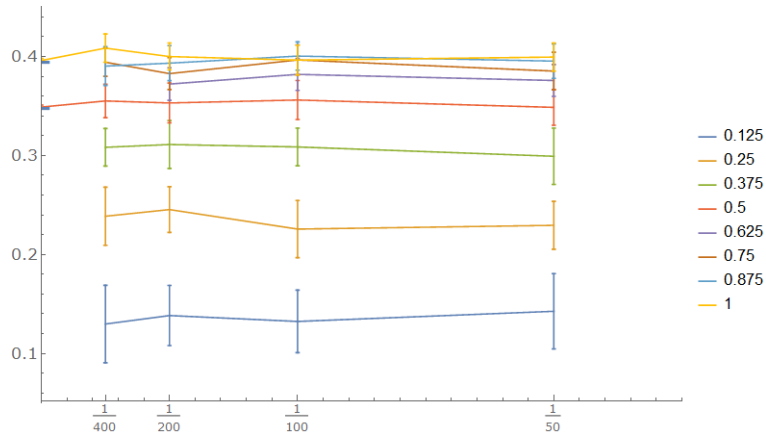


Рис. 2: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при открытых гран. условиях

Важнейшим параметром в описании полученной симуляциями Монте-Карло блуждания из  $N$  узлов является радиус инерции, численно равный среднему квадратическому расстоянию частиц ( $i$ -я частица в блуждании имеет вектор  $w_i$ ) от положения среднего арифметического центра система (сумма  $w_k$  в скобке) [7]:

$$R_g^2 = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left( w_i - \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_k \right)^2 = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^N (w_i - w_j)^2 \quad (3.3)$$

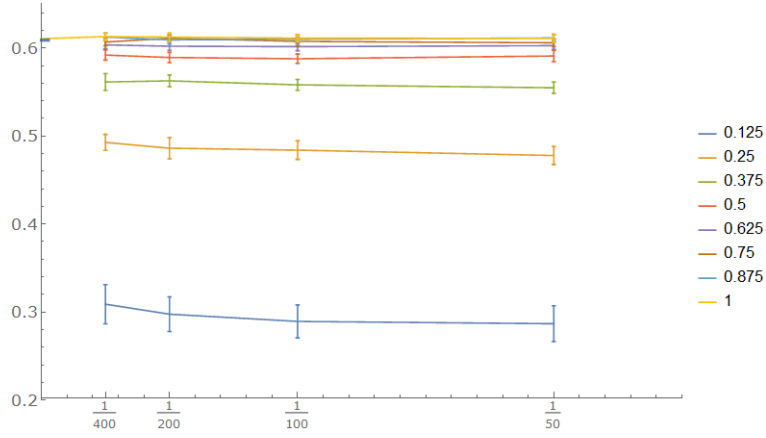


Рис. 3: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при периодических граничных условиях

(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] :

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

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

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{(N+1)} \sum_{i=0}^N w_{i,\alpha} w_{i,\beta} \quad (3.5)$$

$$\sum_{i=0}^N w_i = 0 \quad (3.6)$$

Рассмотрим формулу (3.4). Так как  $w_c$  - центра масс блуждания, то:

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

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

$$w_i = \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N w_i \quad (3.8)$$

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



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

Раскроем суммирование у учётов зависимостей индексов:

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

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

$$Q_{N,\alpha\beta} = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,k=0}^N (w_{i,\alpha} - w_{k,\alpha})(w_{i,\beta} - w_{k,\beta}) \quad (3.9)$$

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

### 3.3 Связь тензора инерции и тензора вращения

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

$$J = \begin{pmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

$$J_{xy} = J_{yx} = - \sum_{i=1}^N x_i y_i \quad (3.11)$$

$$J_{yz} = J_{zy} = - \sum_{i=1}^N y_i z_i \quad (3.12)$$

$$J_{xz} = J_{zx} = - \sum_{i=1}^N x_i z_i \quad (3.13)$$

В тоже время, формулы диагональных элементов принципиально отличаются:

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

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

$$J_{zz} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 \quad (3.16)$$

Сравнивая с формулой элементов тензора вращения в системе центра масс (3.5), 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  $O_\alpha$ , и поэтому обозначенные моменты одной координатой ( $J_{\alpha\alpha}$  используют сумму квадратов отличных от  $\alpha$  координат.

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

$$Q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{i,\alpha}^2 = \frac{1}{N} \left( \sum_{i=1}^N x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - J_{\alpha\alpha} \right) = R_g^2 - \frac{1}{N} J_{\alpha\alpha} \quad (3.17)$$

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

$$Q_{\alpha\beta} = -\frac{1}{N} J_{\alpha\beta}, \quad \alpha \neq \beta \quad (3.18)$$

Тогда матричный вид формулы тензора вращения (3.5) через тензор инерции (3.10) будет:

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

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

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

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

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

$$S^T Q S = R_g^2 * E - \frac{1}{N} * J_D \quad (3.20)$$

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.

### 3.4 Показатели формы блуждания из тензора вращения

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

В нашем двумерном случае,

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

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

$$\mathcal{A} = \left\langle \frac{(q_1 - q_2)^2}{(q_1 + q_2)^2} \right\rangle_N \quad (3.21)$$

### 3.5 Асферичность прямоугольных решёток

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

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

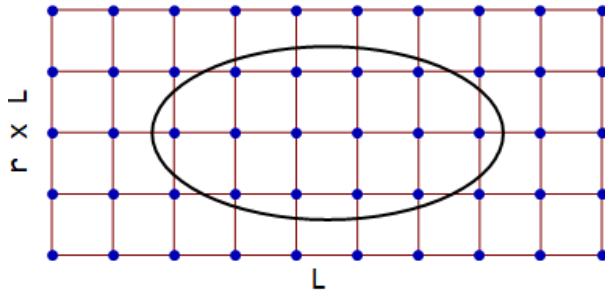


Рис. 4: Пример прямоугольной решётки со стороной  $L = 10$  и отношением сторон  $r = 0.5$  и её эллипс инерции, полуоси которого рассчитаны по формулам (3.22) и (3.23)

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 2: Таблица зависимости значения асферичности прямоугольной решётки от стороны  $L$  и отношения сторон  $r$ . Значения для длины 500 соответствуют значениям из графика 5

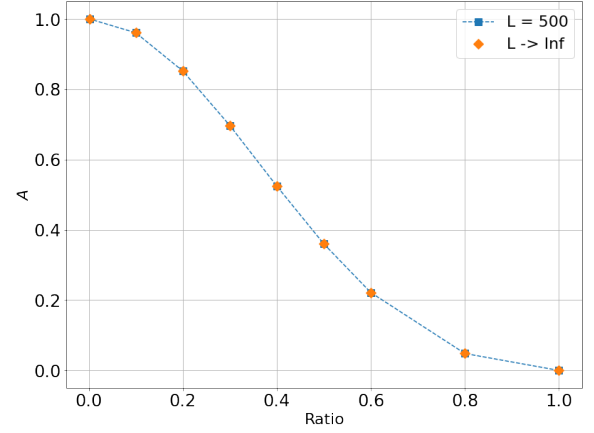


Рис. 5: График зависимости значения асферичности прямоугольной решётки длины 500 и в случае бесконечно большой длины от отношения сторон Ratio (или  $r$ )

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 3: Таблица зависимости значения асферичности прямоугольной решётки бесконечно большой длины стороны  $L$  от отношения сторон  $r$ , отмеченная оранжевыми точками в графике 5 и рассчитанные по формуле (3.26)

$$i_x = \sqrt{\frac{J_{xx}}{N}} \quad (3.22)$$

$$i_y = \sqrt{\frac{J_{yy}}{N}} \quad (3.23)$$

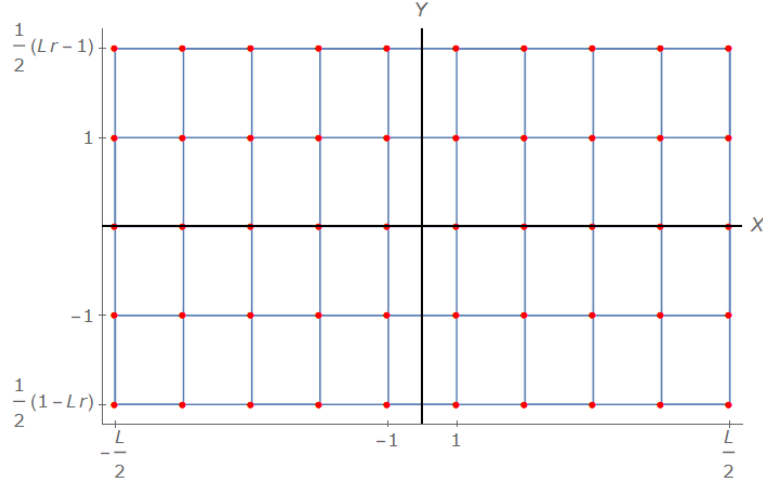


Рис. 6: Модель прямоугольной решётки для расчётов асферичности - она имеет четную и нечетную стороны, чтобы можно было рассмотреть всевозможные случаи

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.

Рассмотрим зависимость получаемой асферичности прямоугольной решётки с нефиксированными отношением сторон  $r$  и стороной  $L$ , чтобы оценить шкалирование данной величины от  $L$ , заметное из таблицы 3. 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 (3.5), 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 6 -  $q_{yy}$  из (3.5)):

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

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

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

$$q_{yy} = \frac{(rL)^2 - 1}{12} \quad (3.25)$$

Перейдём непосредственно к расчёту асферичности по определению (3.21):

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

В итоге, получаем:

$$\mathcal{A} = \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} \right)^2 + O\left[\frac{1}{L^2}\right] \quad (3.26)$$

### 3.6 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 Pollsing) 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 Pollsing в области фазового перехода. Для этого для первых двух моделей была рассчитана зависимость значения асферичности  $\mathcal{A}$  (3.21) от константы взаимодействия  $J$  при длиннах  $N = 1000, 2500, 3600, 4900$ .

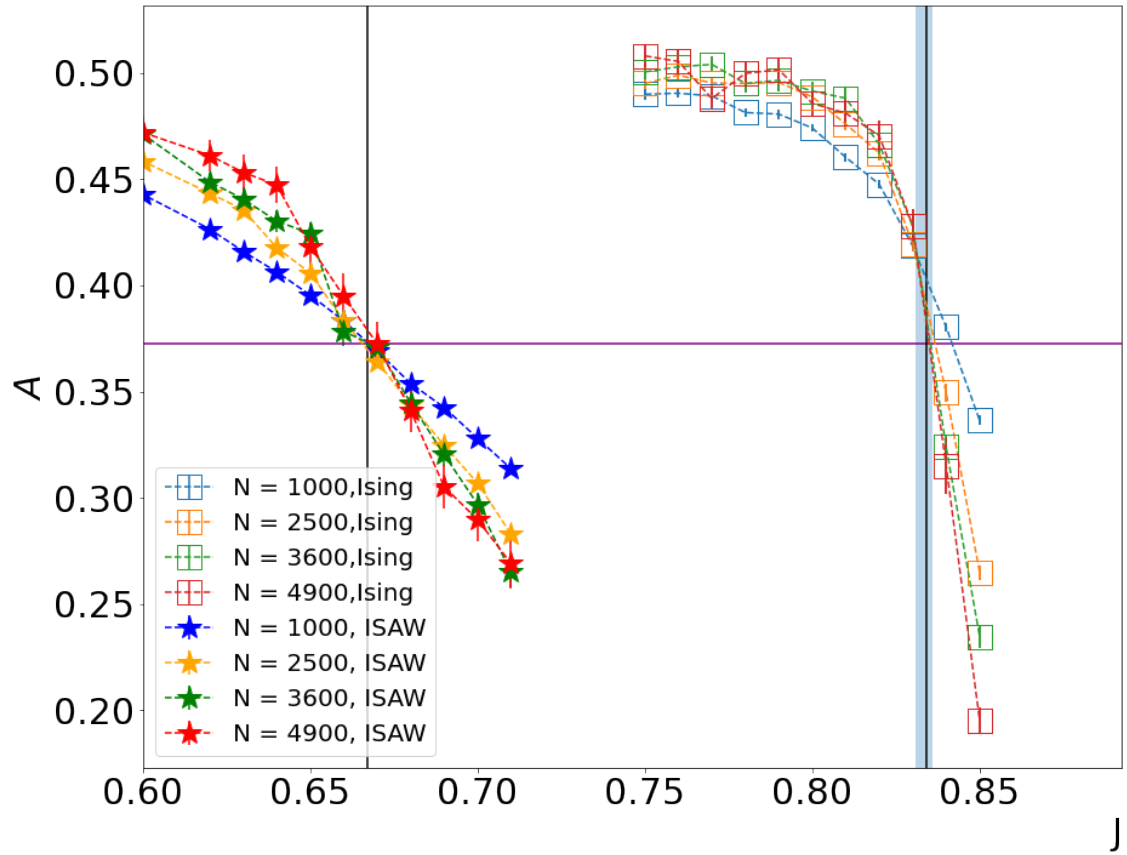


Рис. 7: График зависимости значения асферичности от константы взаимодействия для моделей взаимодействующего блуждания (слева) и Изинга на полимерной цепочке (справа)

Вертикальными линиями обозначены точки фазового перехода моделей: красными линиями отмечены граничные с точки зрения погрешности точки перехода в модели Изинга на гомополимерной цепочке ( $0.833 \pm 0.003$ , или  $T_c = 1/J_c = 1.199 \pm 0.003$  [9]), а черной сплошной - у модели ISAW ( $\approx 0.667$  [7]). Горизонтальной линией отмечено значение асферичности в критической области модели ISAW из статьи Пелиссетто, 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.

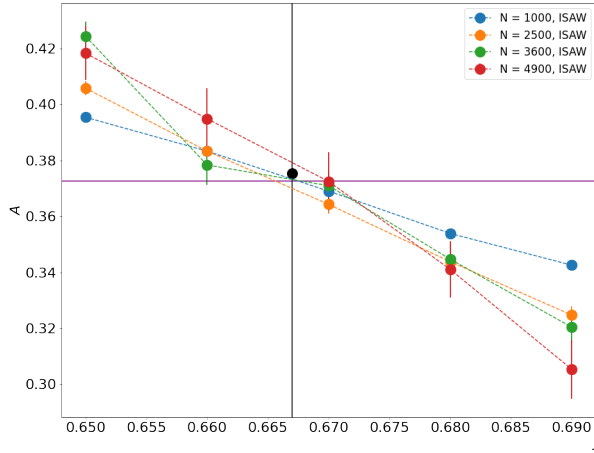


Рис. 8: График 7, увеличенный в масштабе в области фазового перехода модели взаимодействующих блужданий

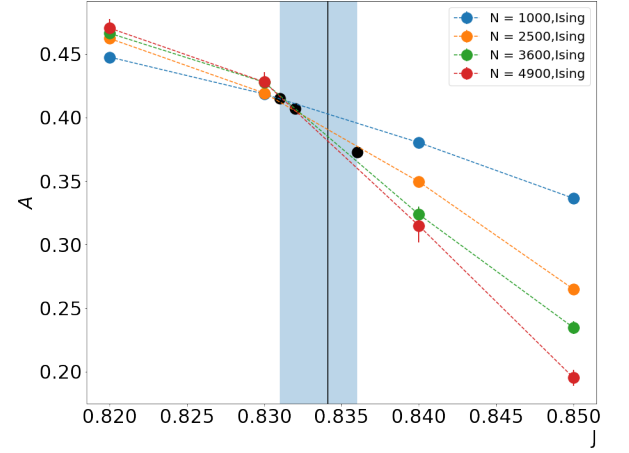


Рис. 9: График 7, увеличенный в масштабе в области фазового перехода Изинга на полимерной цепочке.

Чёрные точки на графиках 8-9 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  $0.348 \pm 0.006$ . В точке на зелёной линии - в точке ближайшей к пересечению (переходу) рассчитаем само значение кумулянта:  $r = 0.47$ ,  $U_4 = 0.343 \pm 0.006$ . Тогда значение критического кумулянта модели Изинга в прямоугольной решётке для Pollsing  $U_4 = 0.343 \pm 0.009$

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

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

Таблица 4: 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.



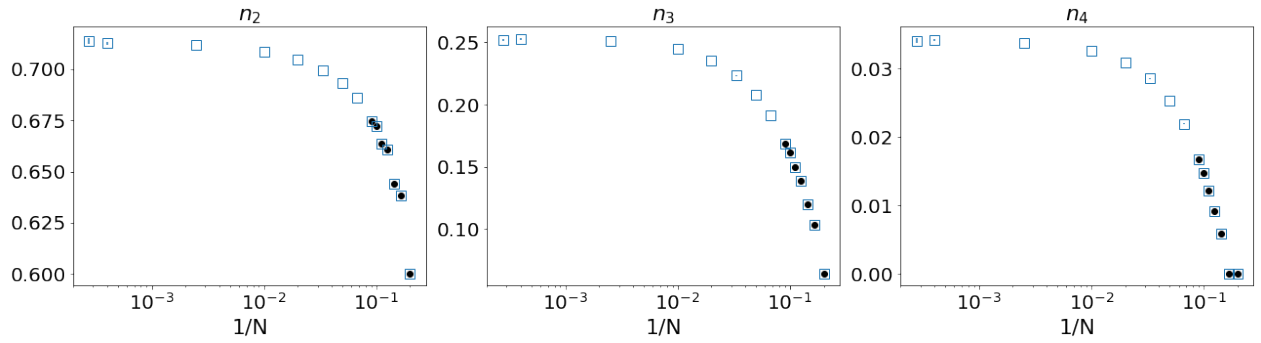


Рис. 11: Зависимостей средних долей узлов конформации с фиксированным числом соседей (от 2 до 4) модели ISAW при  $J=0$  от обратной длины  $1/N$  при длинах конформации  $N=5-3600$ . Пустые квадраты - результаты симуляций Монте-Карло, черные точки - расчёты полученные путём полного перебора возможных конформаций [2]

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

### 4.1 Введение

В данном разделе мы изучаем такое геометрическое свойство модели, как доли узлов с фиксированным числом соседей. У каждого узла можно определить число соседей или количество близких связей на смежных ячейках исследуемой решётки (см. левый рисунок 13). Рассмотрим пример конформации на квадратной решётке на рисунке 10. 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 11 - разные типы расчётов полностью совпали, что говорит о правильности используемого алгоритма.

### 4.2 Особенности ранних результатов на квадратной решётке

Мы провели симуляции Монте-Карло для долей узлов с фиксированным числом соседей для моделей Ising-ISAW и ISAW с зависимостью от значения константы взаимодействия  $J$  для длин  $N=1000, 2500, 3600, 4900$ . Результаты изображены на рисунке 12, а также опубликованы в работе [8].

На графиках 12 примечательны значения в точке  $J=0$  у графиков узлов с 2-мя (левый) и 3-мя (средний) соседями: было первоначальное предположение, что в пределе бесконечной длины конформации они будут равны  $3/4$  и  $1/4$  соответственно. Так

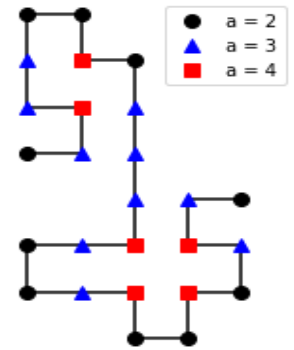


Рис. 10: Пример конформации на квадратной решётке с подсчётом соседей

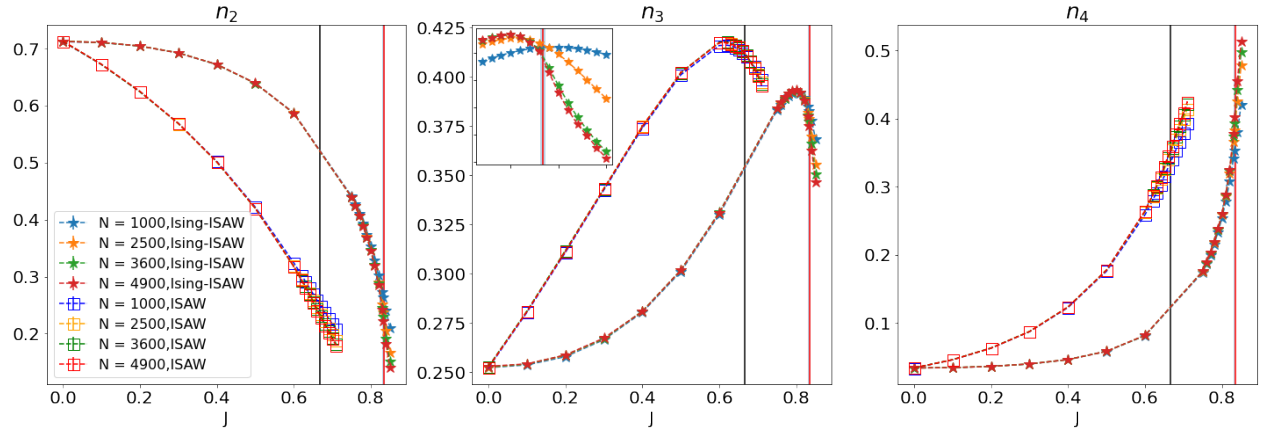


Рис. 12: Зависимость доли узлов конфигурации с двумя (слева), тремя (по центру) и четырьмя соседями (справа) у моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW на квадратной решётке от  $J$ . Черной линией обозначена точка фазового перехода модели ISAW, красной - Ising-ISAW, на квадратной решётке (см. таблицу 5). График взят из работы [8]

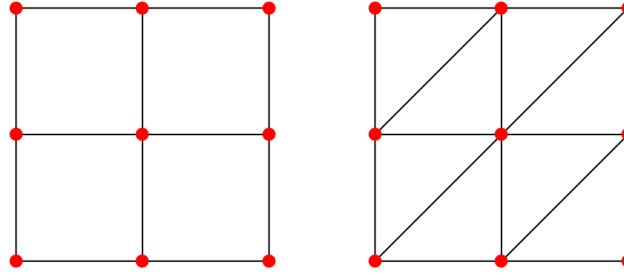


Рис. 13: Связи узлов в квадратной (слева) и треугольной решётках (справа)

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

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

Рассмотрим средние доли узлов с фиксированным числом соседей в решётках, которые имеют от 2-х до 6-ти возможных соседей: в кубической, у которой 5-й и 6-й соседи мономера расположены в соседних плоскостях, и треугольной, где 5-й и 6-й сосед мономера лежат на диагонали, проходящей через данный узел (в данной решётке лишь одна плоскость, см. правый рисунок 13).

График зависимости долей от константы взаимодействия  $J$  (используется в гамильтониане конфигурации по формуле ??, однако в отличие от одномерного случая, где считаются связи между соседними по индексу узлами конфигурации, здесь считаются связи между узлами, лежащими на соседних ячейках исследуемой решётки) изображен на рисунке 14 - слева показаны результаты симуляций Монте-Карло на кубической решётке, справа - на треугольной решётке. Цвета графиков соответствуют длинам цепочек -  $N=100$  зелёные, 300 синие, 600 красные и 1200 фиолетовые. Число шагов симуляций - от  $10^{10}$  вдали от пиков до  $10^{12}$  в районе пиков графиков. Вертикальными линиями отмечены

точки критического перехода:

lattice	Ising-ISAW	ISAW
square	0.8340(5) [8]	0.6673(5) [7]
triangular	Unknown	0.41(7) [13]
cubic	$0.5263 \pm 0.055$ [9]	$0.2779 \pm 0.0041$ [15]

Таблица 5: 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)

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

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

Данные модели Ising-ISAW в свою очередь отмечены на графике 14 звездочками. Стоит отметить, что при прохождении точки перехода в кубической решётке, графики долей узлов с любым числом соседей словно претерпевают скачок, усиливающийся с ростом длины цепочки, в отличие от треугольной решётки, где процесс непрерывен.

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

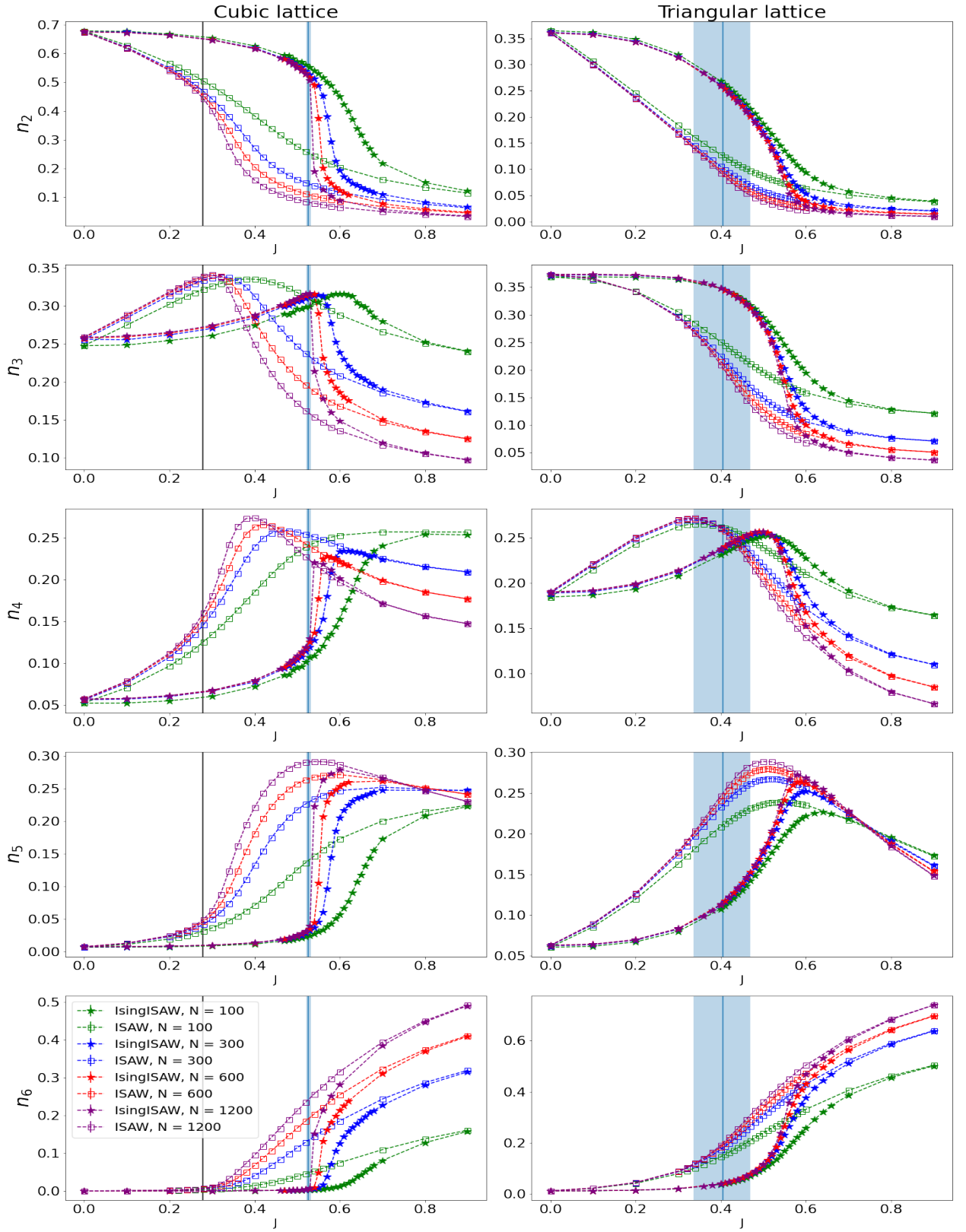


Рис. 14: Зависимость доли узлов моделей Ising-ISAW (звезды) и ISAW (квадраты) на кубической (слева) и треугольной решётках (справа) с 2-6 соседями (сверху вниз) от  $J$  с длинами  $N = 100$  (зеленые), 300 (красные), 600 (синие) и 1200 (фиолетовые). Вертикальные линии отмечают точки фазового перехода моделей 5

#### 4.4 Алгоритм исследования характера зависимости значения долей узлов от длины при J=0

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

1. Линейная аппроксимация

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

2. Лог-линейная или экспоненциальная аппроксимация

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

3. Степенная или лог-лог аппроксимация

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

Чтобы гарантировано получить результат использовалась функция `linregress` из пакета `scipy.stats`, поэтому на данном этапе погрешностью результатов симуляций мы временно пренебрегаем. Так же, чтобы показать нагляднее характер аппроксимации, графики соответствующих способов фитирования будут рассмотрены в том же масштабе - линейный в линейном, экспоненциальный в лог-линейном, степенном в лог-лог-масштабе - таким образом графики фитов будут линейными. Результаты аппроксимаций в порядке, изложенном в списке выше, изображены на рисунках 15 и 16 - в левом столбце аппроксимации записаны для данных цепочек с длинами от 100 до 4900, в правом - длины от 250 до 4900, чтобы оценить поведение модели на больших длинах, следовательно, ближе к нулю.

Графики на рисунках 15 и 16 показывают, что в данном случае экспоненциальная аппроксимация ведёт себя как линейная (что логично вблизи нуля), поэтому можно рассматривать вместо первых двух только линейную. С другой стороны, степенная функция совсем не совпадает с графиком результатов. Более того, значение степени функции-фита настолько мало, что итоговая функция больше похожа на константную прямую.

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

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

Таблица 6: Значения и погрешности коэффициентов линейного фитирования (4.1) зависимости долей узлов с 2-мя соседями на квадратной решётке модели Ising-ISAW при J=0 от исследуемого интервала длин

Результаты использования других диапазонов точек на таблице 6 показывают, что наиболее оптимальный фит (с наименьшей ошибкой) достигается при выборе точек от 250 до 4900. Это можно объяснить тем, что при вы-

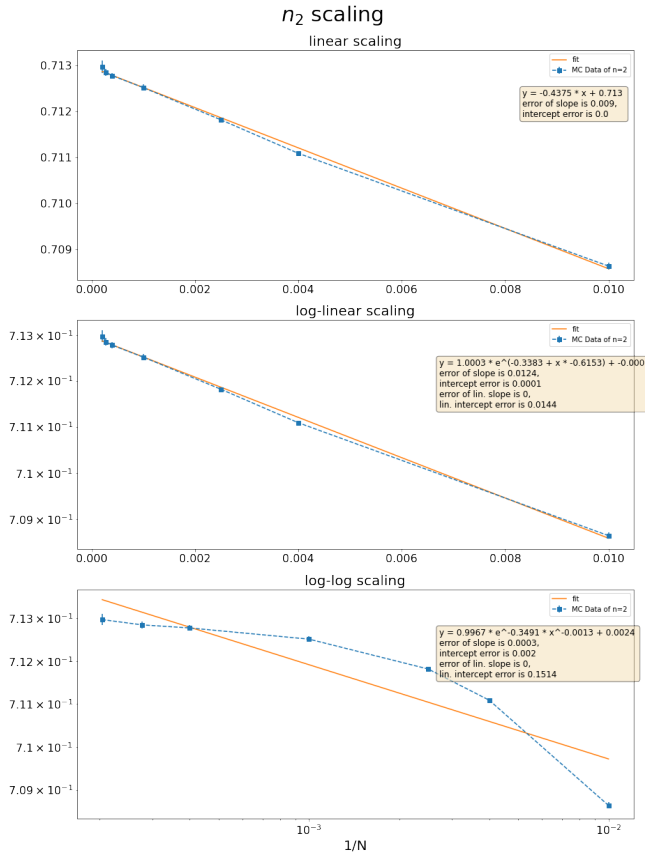


Рис. 15: Результаты аппроксимации (оранжевая линия) данных Монте-Карло о долях узлов с двумя соседями  $n_2$  модели Ising-ISAW на квадратной решётке (синие точки) различными способами на диапазоне длин 100-4900

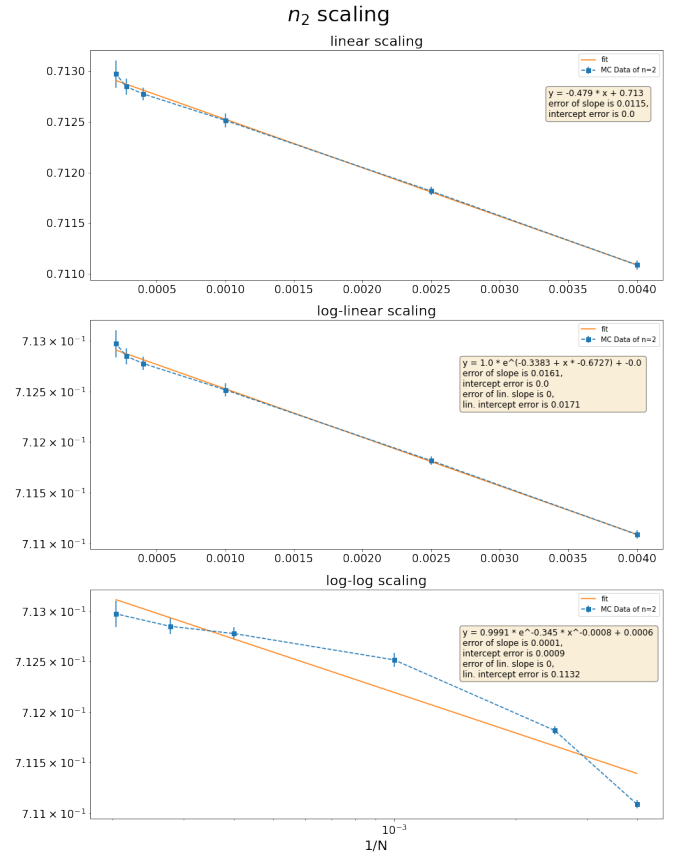


Рис. 16: Результаты аппроксимации (оранжевая линия) данных Монте-Карло о долях узлов с двумя соседями  $n_2$  модели Ising-ISAW на квадратной решётке (синие точки) различными способами на диапазоне длин 250-4900

боре точек большего диапазона линейный характер будет выражен слабее, а при выборе точек меньшего диапазона количество рассматриваемых данных уменьшается, что приводит к росту ошибки (недостаточно статистики). Подобная операция была выполнена и для других чисел соседей и решёток (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 (4.1) без графиков.

Результаты линейного фитирования при выборе разной наименьшей рассматриваемой длины можно увидеть на таблицах 7 и 8. По погрешностям на первых строках обеих таблиц понятно, что оптимальным диапазоном будет 250-4900. Для 3-4D-гиперкубических решёток так же заметно (по погрешностям соответствующих строк), что отбрасывание длины  $N=100$  из рассматриваемых улучшило точность результатов. Единственное исключение - треугольная решётка: на ней линейный характер результатов настолько заметен, что при отбрасывании наименьшей длины  $N=100$  ошибка увеличивается (недостаточность статистики стала сильнее, а "линейность" не изменилась).

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

На графике 17 наглядно показано сравнение приближений долей "одномерных" участков (то есть, долей мономеров с двумя соседями) и узлов с тремя соседями в цепочках на квадратной, треугольной, кубической и гиперкубической решётках. Для расчётов долей на треугольной решётке были использованы длины 100-1200, для квадратной - 250-4900, для кубической и гиперкубической - 200-1200. Фитирование долей треугольной решётки имеет отчётливый линейный характер, даже в приближении на короткие длины. Линейность долей прямоугольных решёток всех размерностей также подтверждается (с учётом погрешности расчётов с наибольшей длиной).

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

Таблица 7: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 17 для длин  $N$  от 100 до 4900 (для квадратной) и 1200 (для остальных решёток)

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

Таблица 8: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям узлов с 2-4 соседями из рисунков 17 для длин  $N$  от 250 до 4900 (для квадратной) и от 200 до 1200 (для остальных решёток)

Из таблицы 9 по первым двум строкам, отображающим данные о прямых-фитов квадратной и треугольной решётки соответственно, сходства между одномерием треугольной и квадратной решётки с точки зрения коэффициентов фитирования  $a$  и  $b$  (4.1) почти не наблюдается - они имеют как разные значения свободных членов, так и значения и даже (в случае 2-х соседей) знаки коэффициента наклона, разница 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 9) отличается почти в два раза: 0.71299(2) и 0.35989(1) (что логично, ведь в треугольной решётке диагональные ячейки так же считаются соседними, поэтому половина поворотов конфигурации добавит соседей).

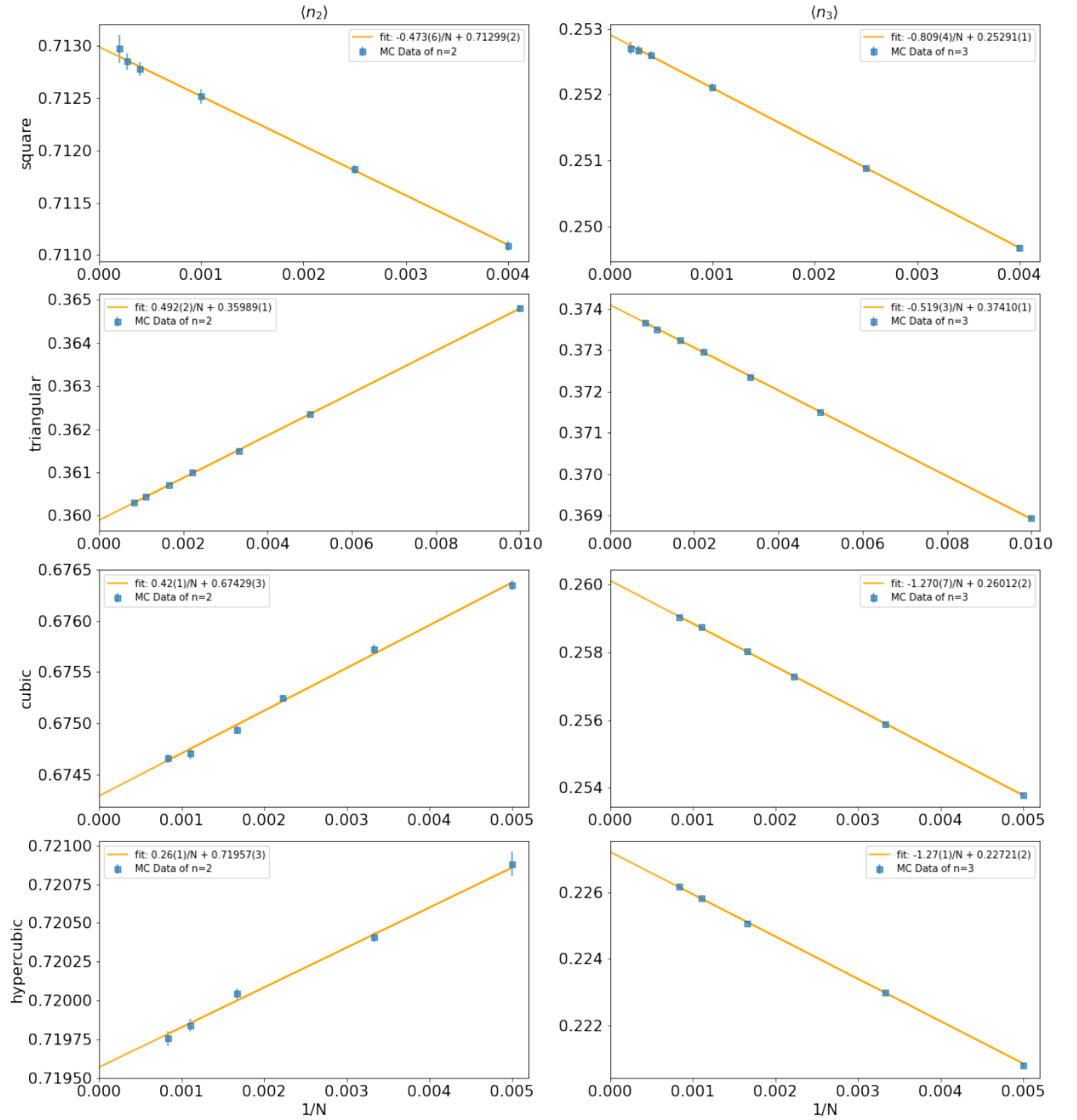


Рис. 17: Зависимость средней доли узлов с 2-мя соседями (слева) и 3-мя (справа) от обратной длины  $1/N$  в модели Изинга на случайном блуждании на квадратной, треугольной, кубической и гиперкубической (сверху вниз). Синие точки описывают результаты симуляций Монте-Карло, оранжевая линия - график линейной аппроксимации результатов, ошибки рассчитаны с учётом погрешностей полученных данных. Коэффициенты и диапазоны длин рассматриваемых данных записаны в таблице 9



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

Таблица 9: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям улов с 2-4 соседями из рисунков 17 - наилучшие приближения с подбором диапазона длин для каждого графика (в столбце N)

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

Таблица 10: Коэффициенты прямых, полученные линейным фитированием (4.1) данных симуляций Монтекарло по долям улов с 5-6 соседями

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

Здесь мы сравниваем линейное фитирование результатов симуляций Монте-Карло треугольной решётки с кубической, имеющей такое же количество возможных соседей, а так же результаты для гиперкубической решётки в  $J=0$ . Коэффициенты линейного фитирования (4.1) отображены в таблицах 9 и 10: 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 11, поэтому мы рассматриваем число соседей лишь от 2 до 6.

Рассматривая средние строки таблицы 9, где записаны коэффициенты прямых фитирования для  $n_2$  и  $n_3$  треугольной и кубической решётки соответственно, а так же средние графики на рисунке 17, мы видим примерно ту же ситуацию как и в случае сравнения треугольной с квадратной - кубическая решётка на графике 17 показывает почти чёткий линейный характер приближения в пределах погрешности наибольших длин (для  $n=3$  линейно видна значительно лучше), но ни коэффициенты наклона  $a$ , ни значения свободных членов  $b$  не имеют никакого сходства. Единственное отличие от сравнения с квадратной решёткой - графики соответствующих долей треугольной, кубиче-

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

ской и гиперкубической решёток имеют одинаковое поведение с точки зрения знака наклона, что действительно и для долей узлов с большим числом соседей. Можно утверждать, что треугольная решётка с точки зрения поведения доли одномерных участков больше похожа на кубическую решётку, нежели квадратную, однако точной численной универсальности (например, почти равных в пределах погрешности коэффициентов) поведения доли "одномерных" участков между ними при бесконечно больших длинах конформации не обнаружена.

Единственная пара коэффициентов, которая оказалась равна в пределах погрешности, являются коэффициенты наклона у линейного фитирования  $a$  (4.1) для долей узлов с 3-мя соседями  $\langle n_3 \rangle$  у кубической и гиперкубической решёток (см. таблицу 9).

## 4.7 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  $\omega_0$ , 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  $\omega_{i-1}$ , а  $i+1$ -м - возвращается в него, то есть  $\omega_{i-1} = \omega_{i+1}$ . В таком случае на графике блуждания возможны "шипы", концы которых будут узлами с всего одним соседом - основанием "шипа".

Алгоритм обработки каждого моделируемого блуждания описан на картинках 18, 19 и 20:

- 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 12 и изображены на графике 21<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Процесс симуляций был запрограммирован на языке Python и проводился с использованием суперкомпьютера НИУ ВШЭ. Оптимизация требовала дополнительного изменения окружения - см. технический раздел 6.1

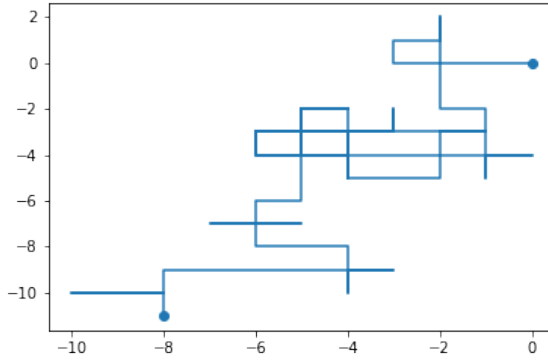


Рис. 18: Пример сгенерированного блуждания Random-Walk

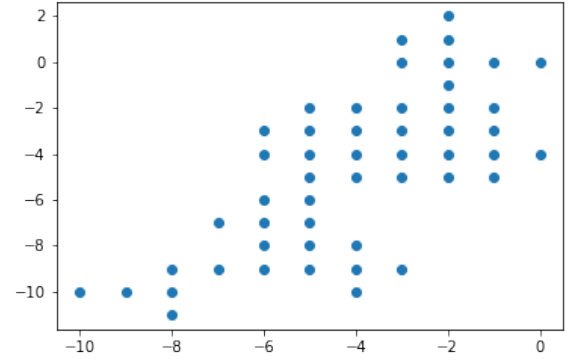


Рис. 19: Набор уникальных точек, принадлежащих блужданию Random-Walk

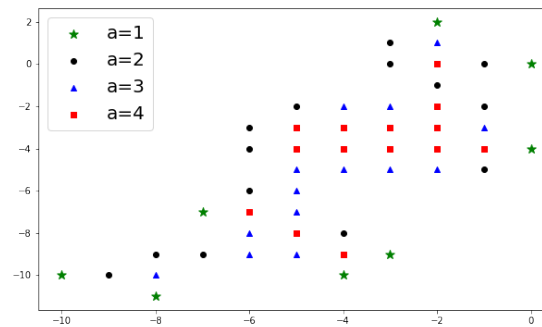


Рис. 20: Пример подсчёта соседей у каждого узла блуждания

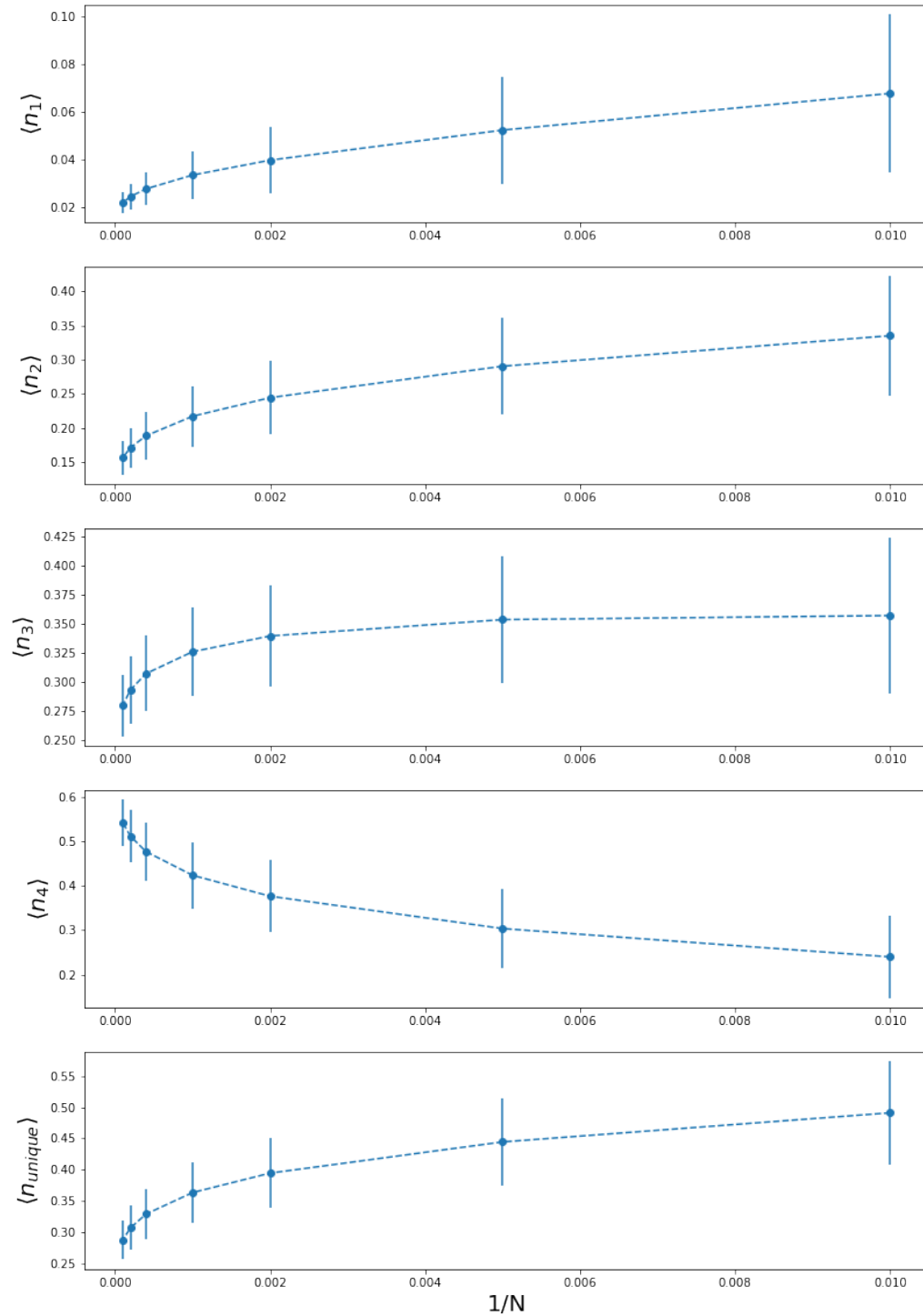
#### 4.7.1 Погрешности результатов

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 22 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 22, 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.

Рис. 21: Зависимость долей узлов с фиксированным число соседей в случайном блуждании от обратного кол-ва шагов в конформации  $1/N$



N	<i>steps</i>	<i>unique</i>	$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_4$
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 12: Средние доли узлов с 1-4-мя соседями в конформациях модели Random-Walk длин  $10^2 - 10^4$

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....)

#### 4.8 Число соседей в атмосферах Преллберга

В статье [12] 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 23: 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).

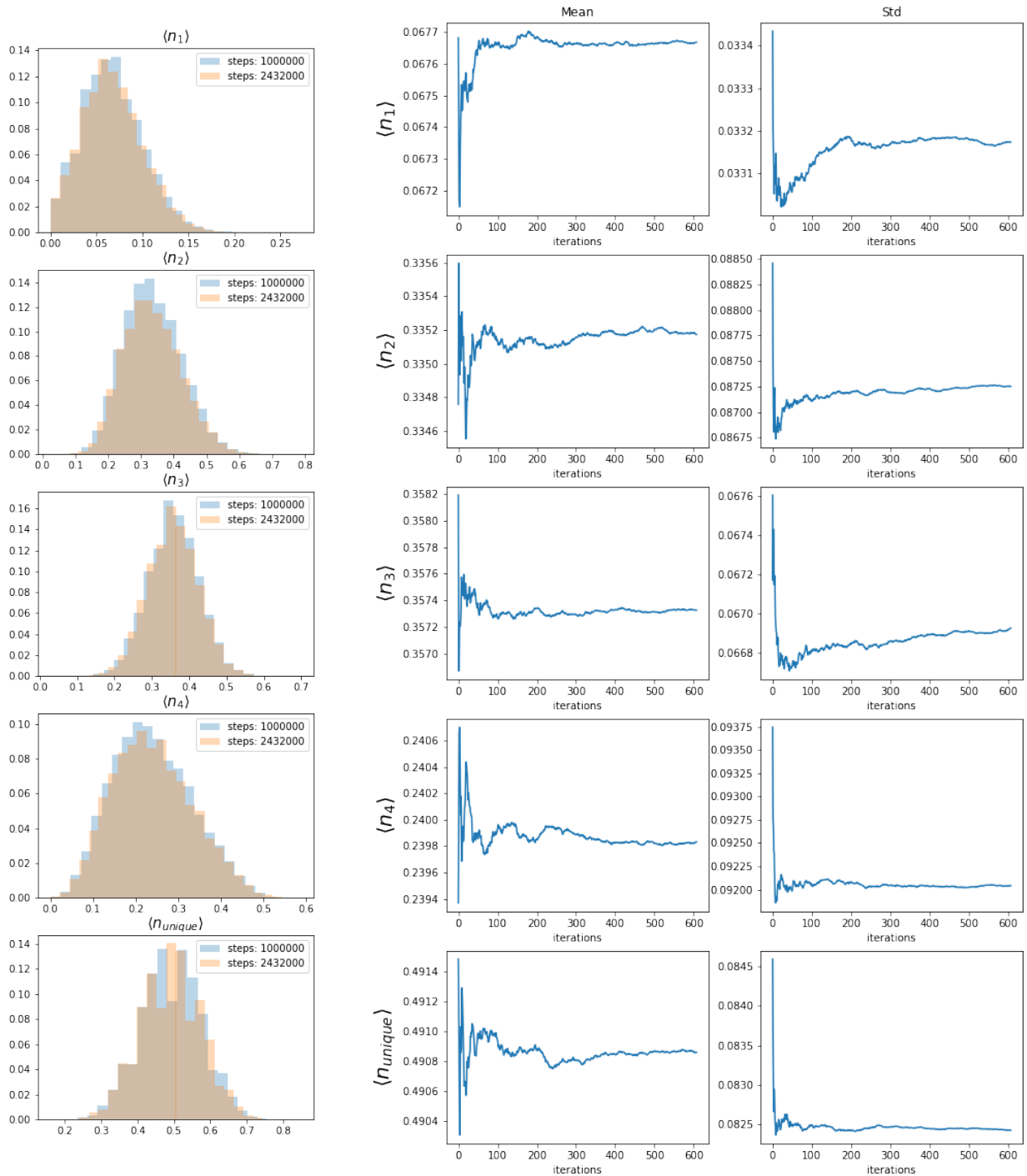
Так же при атмосфере 2 - как на среднем рисунке 23 - когда, уже имея два соседа (черная конечная точка) и две возможности для удлинения, N-ый узел при удлинении будет иметь 3 соседа (треугольник в том же месте на правой половине).

И наконец, при атмосфере 1 (последний рисунок 23) 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 23. Очевидно, что случай удлинения при атмосфере 0 рассмотреть невозможно, и провести аналогию с соседями нельзя.

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

С другой стороны, подобная интерпретация атмосферы Преллберга не учитывает перерасчёт соседей у других узлов после удлинения цепочки - так, на примере атмосферы 1 (на нижнем рисунке 23) 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

Рис. 22: 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



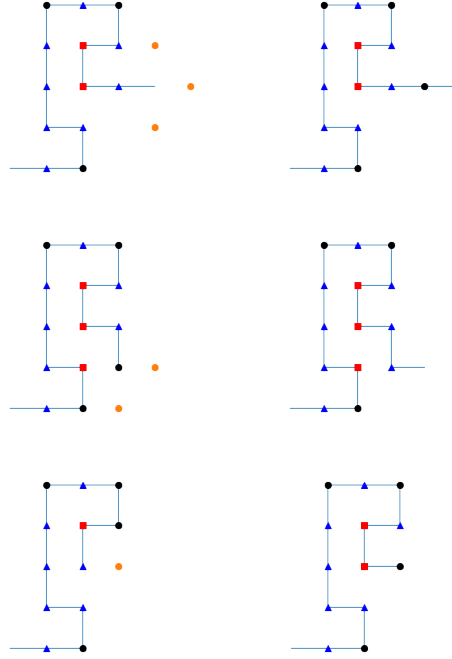


Рис. 23: Пример удлинения цепочки на квадратной решётке с атмосферой 3,2,1 (сверху вниз): слева изображена конформация до удлинения, справа - после, возможные способы добавить новый узел отмечены оранжевым, разметка узлов по количеству соседей соответствует рисунку 10

поверхностным узлом (синим треугольником в том же месте на правой половине).

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

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

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

На таблице 13 слева изображены значения свободных членов графика зависимости вероятности гомополимерной цепочки иметь атмосферу  $k$  в статье [12], то есть вероятность, что второй конец цепочки бесконечно большой длины  $N$  имеет  $k$  возможных направления для удлинения и следовательно,  $k$  возможных узлов, которые могут стать новым узлом в цепочке. Справа изображены значения свободных членов приближений графиков долей узлов с  $i$  соседями. Хотя все значения отличаются больше чем на погрешность расчётов, однако нельзя не заметить довольно близкое сходство  $p^{(3)}$  и свободного члена  $\langle n_2 \rangle$ , хотя сами приближения имеют противоположные по знаку наклоны.

В частной переписке с автором статьи была предложена следующая коррекция результатов [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 14: Вероятности у конформации иметь k-ю атмосферу (слева) и долей мономеров с i соседями (справа) в пределе бесконечной длины в случае гарантированно возможного удлинения

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

#### 4.9 Задача Спитцера и применение к ранним результатам

Подобная атмосферам Преллберга задача рассматривалась в книге [16], 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  $\chi$ :

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

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 посещённых 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 13 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.

В рамках летней производственной практики (см. Отчёт о практике) задача из работы Спитцера была теоретически и экспериментально решена. Результаты расчётов можно увидеть в таблице 4.9:

$p_1$	$p_2$	$p_3$	$p_4$
0.393566	0.314680	0.190025	0.101729

Ответ задачи не имеет численного сходства с ранее рассмотренным предельным локальным координационным числом моделей СБС и Rand-Walk для квадратной решётки (таблицы 14 и 12 соответственно).

С другой стороны, можно говорить о том, что данная задача рассматривает число соседей в конце цепочки, и можно выдвинуть предположение, что ответ задачи можно интерпретировать как атмосферу, но не СБС, а простого случайного блуждания. Определим атмосферу простого случайного блуждания  $k$  как *количество незанятых блужданием узлов решётки вокруг конечного мономера*. Как было сказано ранее, простого блуждание может передвигаться по ранее занятым узлам решётки, поэтому её атмосфера в контексте работы [12] - то есть, как число способов добавить новый узел - на двумерной решётке всегда равна 4. Однако новое определение является справедливым для обеих моделей, причём без потери смысла для SAW, первичной модели для этого понятия. Была рассчитана вероятность блуждания Rand-Walk фиксированной длины  $N$  иметь атмосферу  $k$ . Результаты можно увидеть в таблице 15 и на графике 24.

$N$	$p_0$	$p_1$	$p_2$	$p_3$	steps
100	0.182831	0.246855	0.290593	0.279720	96430000
200	0.231971	0.251413	0.269204	0.247413	36140000
500	0.290471	0.250914	0.244515	0.214100	7720000
1000	0.329962	0.247547	0.228218	0.194273	2480000
5000	0.409736	0.235407	0.195493	0.159364	140000
10000	0.436525	0.227300	0.190725	0.145450	40000

Таблица 15: Результаты экспериментов, описанных на графике 24

## 4.10 Планируемая деятельность

- Дополнительные запуски симуляций для длин, расположенных между выполненными на графике 24:  $N = 150, 350, 750, 3000, 6500, 8000$

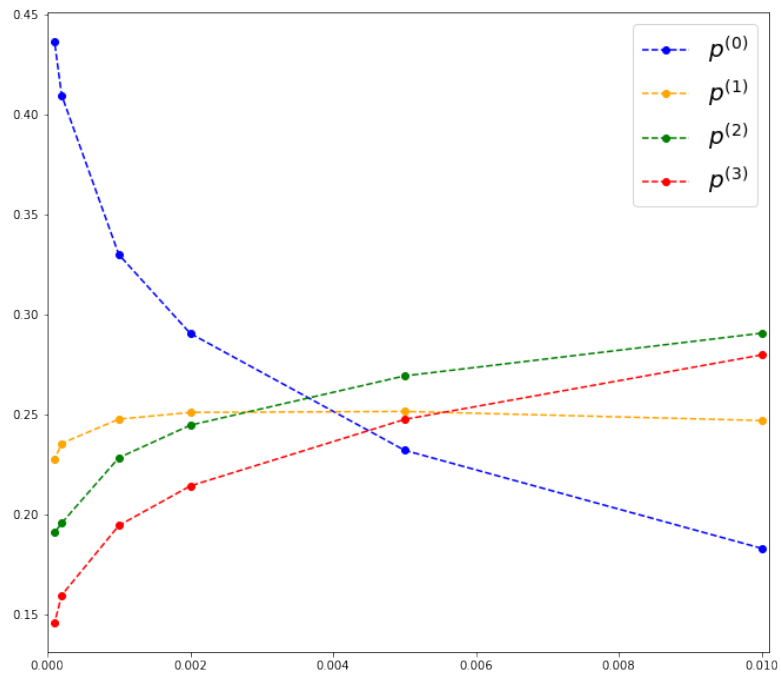


Рис. 24: Вероятность конформации модели Rand-Walk длины  $N$  иметь атмосферу  $k=0,1,2,3$

- 3-я итерация программного кода для симуляции модели Rand-Walk - добавление в модель аналога квадратной решётки с целью упрощения расчётов уникальных узлов и их соседей.
- Определение характера аппроксимации вероятностей  $p^{(k)}$  для Rand-Walk и расчёт предельного значения (при  $1/N \rightarrow 0$  или  $N \rightarrow \infty$ )

## 5 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.

### 5.1 Livne, Meirovich: Polymers Adsorbed on a surface

#### 5.1.1 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  $\epsilon$
- Вероятность  $i$ -й конформации считается последовательно: вводится новая статсумма, суммирующая для заданного направления текущей недостроенной цепочки всевозможные хвосты остаточной длины (10) [10].

#### 5.1.2 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  $z_{k-1}$ :

$$Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) = \sum_j \exp(-\epsilon m_j(0)/k_b T) \quad (5.1)$$

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

$$p_k(v|b, z_{k-1}, v_{k-1}) = Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) / \sum_v Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) \quad (5.2)$$

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

$$P_i(b) = \prod_{k=1}^N p_k(v_k|b, z_{k-1}, v_{k-1}) \quad (5.3)$$

### 5.1.3 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.

## 5.2 Madras, Sokal: The Pivot Algorithm

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

### 5.2.1 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. Второй метод становится крайне затратным при большой длине цепочки, поэтому при  $N \geq 2400$  чаще применялась термолизация прямых цепочек.

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

$$\langle \omega_N^2 \rangle \sim N^{2\nu}$$

$$\langle S_N^2 \rangle \sim N^{2\nu}$$

В оценке будущей работы было так же отмечено, что алгоритм Пивота не подходит для расчёта связующей  $\mu$  и критической  $\gamma$  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".

## 5.3 Спicer: Теория случайных блужданий

Основным объектом исследования в книге [16] является класс случайных блужданий, допускающих пересечение. В их число входит интересовавшее в рамках летней производственной практики простое случайное блуждание на двумерной решётке.

Первые две главы являлись ознакомительными, как с самим классом случайных блужданий и их свойств, так и с аппаратом исследования их поведения способом гармонического анализа. В наиболее привлекавшей внимание главе №3 косвенным образом рассматривалось свойство локального координационного числа одного из концов блуждания бесконечной длины - оно было представлено в задаче 3.9.

Полный обзор книги и в особенности главы №3 можно прочесть в отчёте о проведении летней производственной практики.

## 6 Программно-техническое приложение

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

### 6.1 Применение jit-компиляции при программировании на языке Python

Симуляции случайного блуждания с самопересечениями (для кода см. папку *Random\_Walk* [1]) были запрограммированы на языке Python с компиляцией с помощью пакета numba метод jit. В качестве окружения была использована стандартная библиотека *Python/Anaconda\_v11.2021* встроенная в стандартное ПО суперкомпьютера.

Выполнение первых экспериментов по симуляциям шло крайне медленно - результаты за семь дней можно увидеть на таблице 16

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 16: 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 `numpy` можно найти [здесь](#).

## 6.2 Итерации программного комплекса Rand-Walk

Подраздел посвящён описанию версий программного комплекса для симуляций модели простого случайного блуждания фиксированной длины  $N$  на квадратной решётке. (для кода см. папку *Random\_Walk* [1])

1. **Drunken\_Sailor\_def.py** - базовый алгоритм симуляций, предназначенный для проверки работы основных функций:

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

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

2. **Drunken\_Sailor.py** - первая версия симуляционного комплекса с `jit`-компилируемой частью. Алгоритмически не отличается от **Drunken\_Sailor\_def.py**, но значительно быстрее базовой версии
3. **Drunken\_Sailor\_v2.py** - оптимизированная версия **Drunken\_Sailor.py** с расширенной `njit`-компиляцией:

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



## Список литературы

- [1] 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  $\theta$ -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] AL Owczarek and Thomas Prellberg. Scaling of the atmosphere of self-avoiding walks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 41(37):375004, 2008.
- [13] V Privman. Study of the point by enumeration of self-avoiding walks on the triangular lattice. 19(16):3287–3297, nov 1986.
- [14] 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.
- [15] 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.
- [16] Ф Спидер. *Принципы случайного блуждания*. М.: Мир, 1969.