

Научный отчёт по проекту Решеточные модели макромолекул

Москаленко Роман

1 Цель проекта

Разработка программного комплекса моделирования модели Изинга на ансамблях случайных графов для последующего исследования их термодинамических характеристик.

2 Алгоритмы

Мною были реализованы два алгоритма обновления спинов. Односпиновый и кластерный апдейт. Оба алгоритма работают на произвольном графе, используя таблицу соседей. Алгоритмы реализованы как отдельные библиотеки для Python, и написаны с использованием технологии Cython для ускорения работы. Кластерный апдейт является более эффективным по времени работы и количеству шагов, которые необходимо выполнить для хорошей сходимости модели.

2.1 Проверка алгоритмов

Чтобы убедиться что алгоритмы работают правильно я проверил, что оба алгоритма дают одинаковые результаты на различных конфигурациях, так же сравнил их с точными решениями для одномерной модели Изинга.

Результаты замеров кластерным и односпиновым апдейтом совпадают в пределах погрешности.

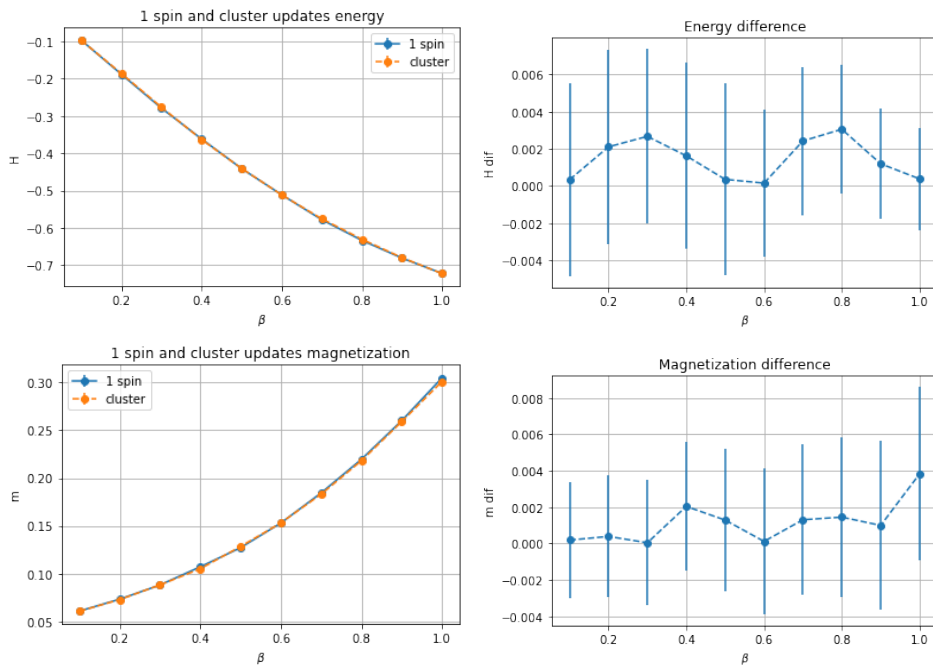


Рис. 1. кластерный и односпиновый апдейт

Замеры совпадают с точным решением одномерной модели Изинга с открытыми граничными условиями



(а) Конформация эмитирующая одномерную модель

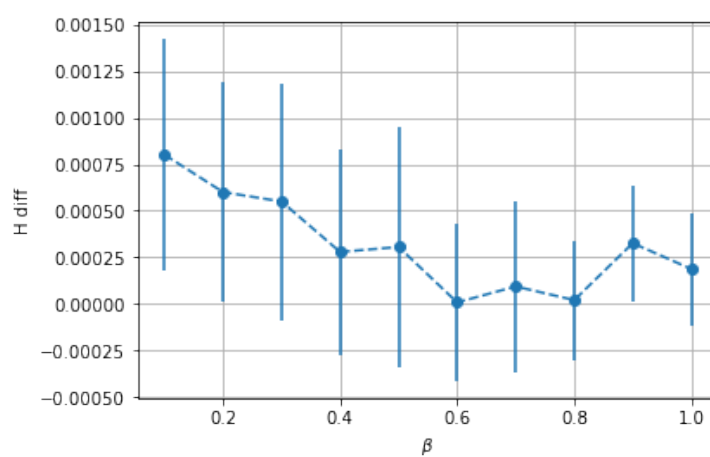
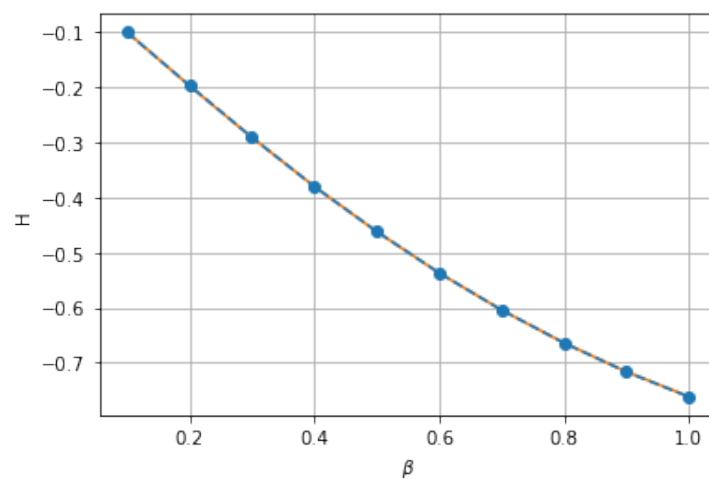


Рис. 2. Сравнение с точным решением одномерной модели

3 Текущие результаты замеров

Пока что замеры проводились только для конфигураций сгенерированных в двумерном пространстве.

Как и ожидалось, неплотные конфигурации оказались близки к одномерной модели изинга, в них не возникает намагниченность и нет фазового перехода. В свою очередь плотные графы близки к двумерной модели, и намагничиваются при низких температурах.

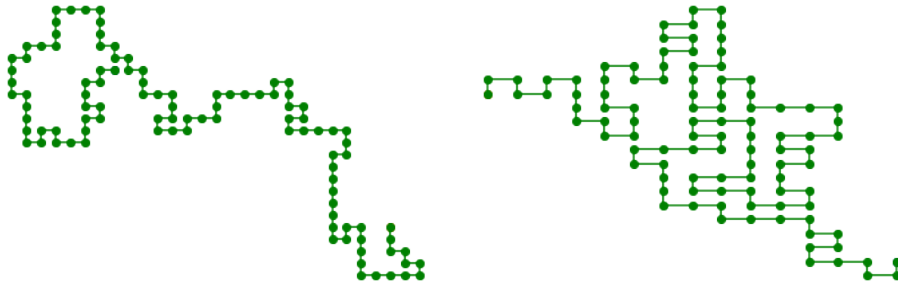


Рис. 3. Пример неплотной и плотной конфигурации

В данный момент я занимаюсь нахождением точки фазового перехода в плотных графах.