

# Информация о замерах

Москаленко Роман

24.05.2021

## 1 Введение

В данном проекте проводится исследование модели Изинга на фиксированной двумерной конформации.

Возьмём конформацию(связанную не само пересекающуюся последовательность узлов) на двумерной решётке. Такие конформации можно рассматривать как термодинамическую систему, основанную на модели Изинга, для которых существуют две фазы: плотная(глобулярная) и развёрнутая. Эти фазы соответствуют низким и высоким температурам системы.

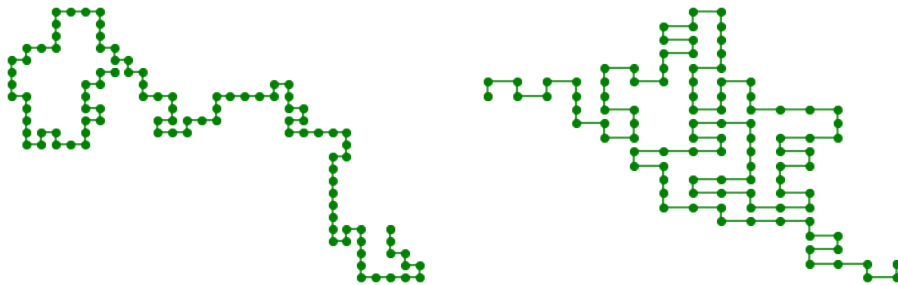


Рис. 1. Пример неплотной и плотной конформации

Если посмотреть на изображения конформаций каждого вида, хорошо видно, что плотные конформации по структуре близки с двумерным решёткам, где у каждого узла имеется множество соседей, и развёрнутые конформации наоборот близки к одномерным структурам, где узлы у которых больше 2 соседей встречаются редко. Соответственно можно предположить, что плотные конформации будут иметь свойства схожие с двумерными решётками, а развёрнутые с одномерными.

## 1.1 Модель изинга

Будем рассматривать конфигурацию как модель Изинга. В каждом узле конфигурации размещён спин  $s_i$  принимающий значения  $+1, -1$ . Внешнее поле отсутствует. Гамильтониан системы  $H = -J \sum_{i,j} s_i s_j$  где  $i, j$  индексы соседних узлов,  $J$  - коэффициент взаимодействия.

## 1.2 Метод Монте-Карло

Для моделирования системы используется метод Монте-Карло. Мною были реализованы версии с односпиновым и кластерным апдейтом, однако для измерений я использовал кластерную версию. Благодаря отказоустойчивости она работает значительно быстрее, и быстрее сходится, особенно при низких температурах.

На каждой итерации мы выбираем случайный спин и начиная с него начинаем строить кластер из одинаково направленных спинов, добавляя новые спины в кластер с определённой вероятностью. затем мы меняем значения спинов в кластере на противоположные.

# 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.

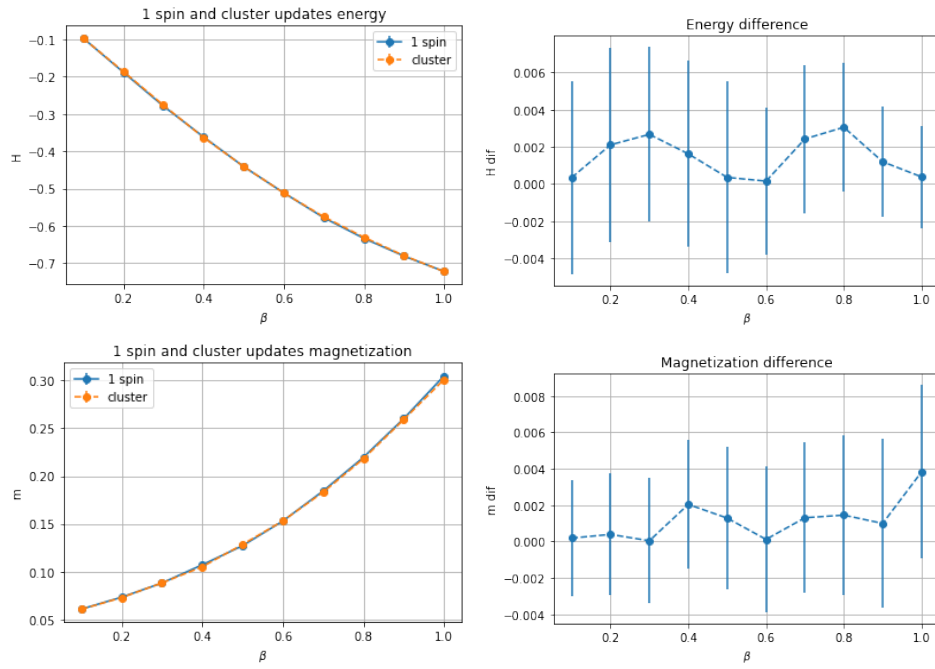


Рис. 2. кластерный и односпиновый апдейт

Для сравнения с точными значениями для одномерной модели Изинга, я беру замкнутый квадратный контур, очевидно что данная конфигурация по свойствам должна полностью совпадать с одномерной моделью Изинга с открытыми граничными условиями.



(а) Конформация эмитирующая одномерную модель

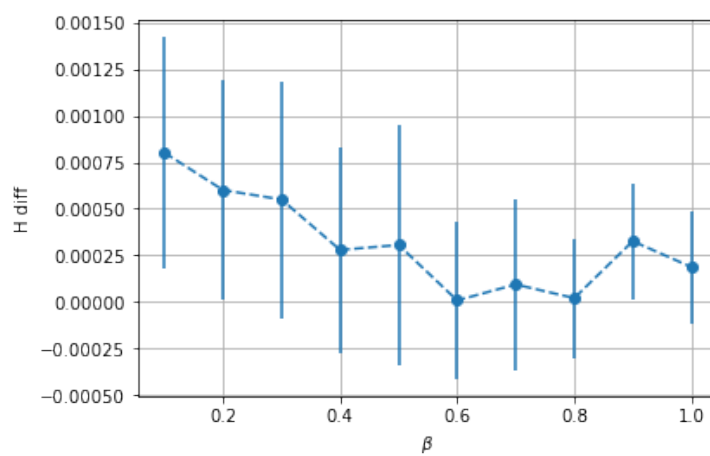
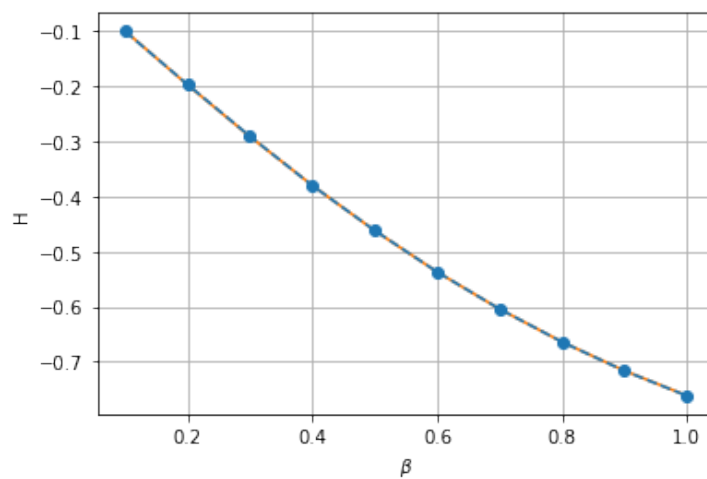


Рис. 3. Сравнение с точным решением одномерной модели

Так же я написал код, точно вычисляющий энергию системы путём полного перебора всех её состояний. И сравнил с результатами.

`mc_lib` Примеры с использованием кластерного апдейта добавлены в библиотеку `mc_lib`.

## 3 Замеры

### 3.1 $U = 1$

Для вычислений я сгенерировал по 1000 реплик длины 250, 500, 1000, 2000. При моделировании методом Монте-Карло делал 100000–300000 шагов на отжиг, и 500000–1000000 шагов для замеров. Оказалось что достаточно большая часть этих конформаций неплотные, то есть их свойства ближе к свойствам одномерной решётки, чем двумерной. При попытке посчитать среднее значения кумулянта Биндера неплотные конформации сильно влияли на значение кумулянта, увеличивая погрешность от реплики к реплике.

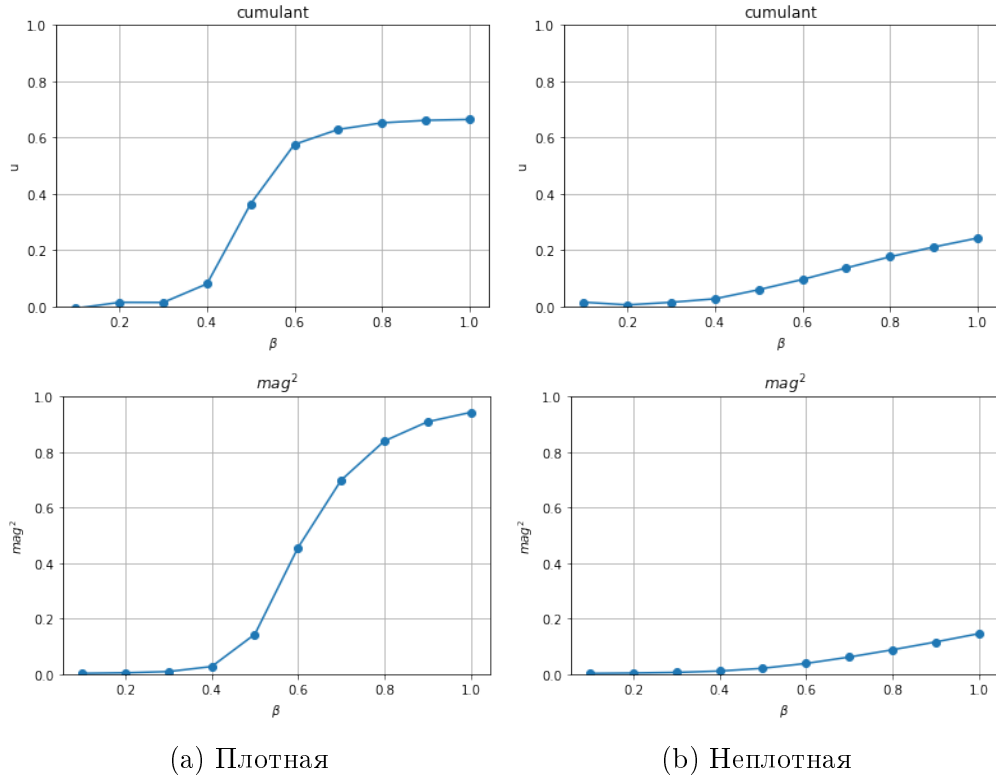


Рис. 4. Пример кумулянта и намагниченности плотной и неплотной конформаций

#### 3.1.1 Разделение конформаций

Для отделения плотных конформаций от остальных было предложено вычислять их радиус инерции.  $R = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i^2}$ , где  $r_i$  это расстояние от

узла конформации до её центра масс. Однако при рассмотрении большого количества конформаций оказалось, что маленький радиус инерции не гарантирует хорошую намагниченность конформации

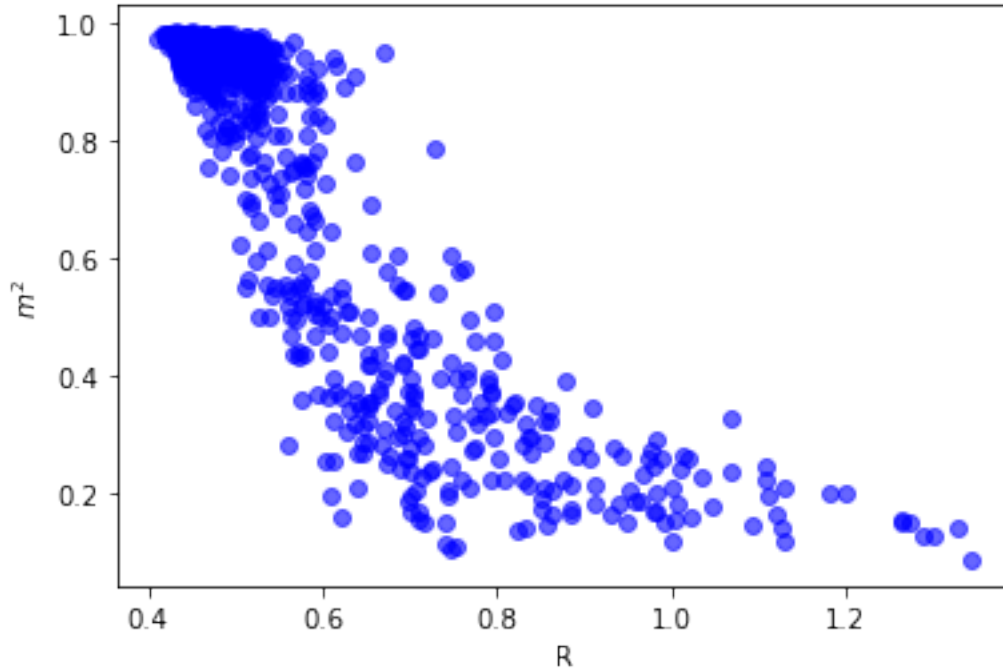


Рис. 5. Корреляция намагниченности конформаций при  $\beta = 1$  и радиуса инерции для конформаций длины  $L = 250$

На рис.5, при  $R \approx 0.6$   $m^2$  принимают любые значения от 0.2 до 1.0. Значит, при разделении конформации только по радиусу инерции, мы либо будем отбрасывать намагничивающиеся конформации, либо оставлять не намагничивающиеся

**Кластеризованные конформации** На искусственном примере рис.6 показана одна из причин, по которой плотная конформация может плохо намагничиваться. Тут имеется несколько крупных двумерных кластеров, соединённых одномерной цепочкой. И не смотря на то, что сами по себе эти кластеры намагничиваются, направление спинов в них слабо связано, из-за чего спины в разных кластерах с большой вероятностью будут направлены в противоположные стороны.

Следующей задачей стало проанализировать конформации на количество и размеры кластеров, а так же мостов(одномерных сегментов)

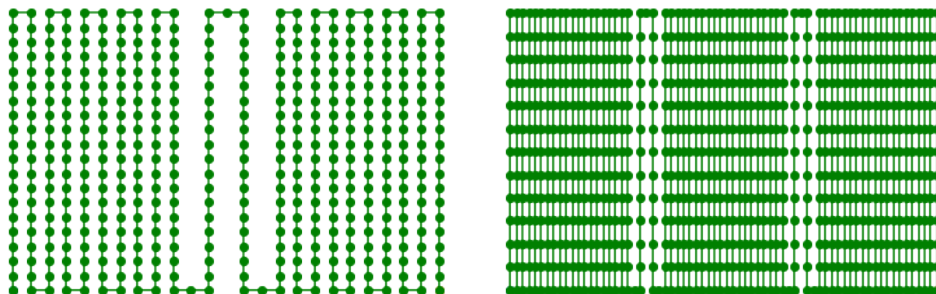


Рис. 6. Пример плотной немагнитной конформации

которые и соединяют. Для этого был написан код со следующим алгоритмом

1. Отметить все спины с 1 или 2 соседями как мосты.
2. Убрать отметки со спинов, среди соседей которых есть не отмеченные спины.
3. Создаём массив, где отмечаем посещённые спины, изначально все спины не посещены.
4. Запускаем DFS(поиск в глубину) из не посещённого спина, который не является мостом.
5. В DFS увеличиваем счётчик размера текущего кластера на 1, и запускаем DFS во всех соседях текущего спина, которые мы ещё не посетили и которые не помечены как мосты.
6. Когда DFS посетил всех возможных соседей, получаем размер данного кластера.
7. Повторяем пункты 4–6 пока не посетим все спины, не являющиеся мостами.
8. Для определения размера и количества мостов делаем всё по аналогии с пунктами 4–7.





Рис. 7. Пример мостов, найденных на конформации

### 3.2 Кумулянт и точка перехода

Кумулянт Биндера для одной реплики при заданной температуре вычисляется по формуле  $U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$ . Дальше Значения усредняются между репликами при каждой температуре  $\langle U \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n U_i$  Погрешность кумулянта от реплики к реплике вычисляется как среднеквадратичное отклонение по формуле  $\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\langle U \rangle - U_i)^2}$

Если отбросить достаточное количество неплотных конформаций, то посчитав кумулянт по оставшимся можно увидеть точку перехода.

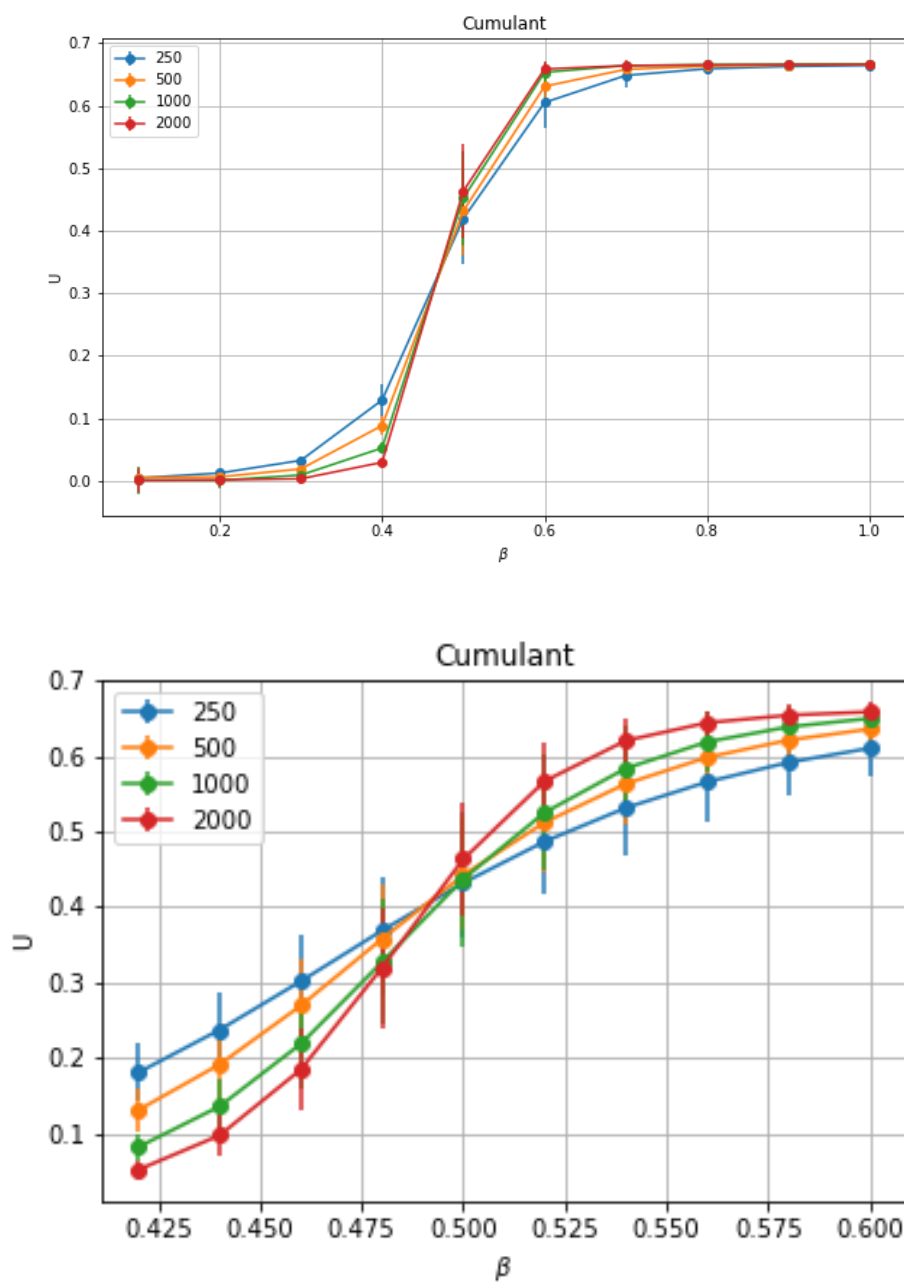


Рис. 8. Значения куулянтов после отбрасывания конформаций по радиусам

## Список литературы

- [1] Ссылка на репозиторий: <https://github.com/MoskalenkoRomanBorisovich/Ising-on-random-conformation>