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.

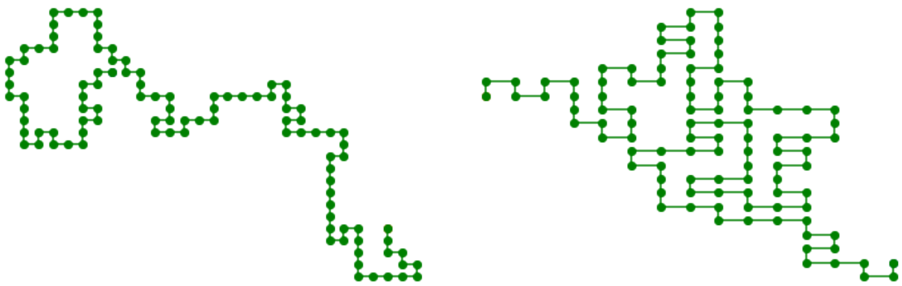


Рис. 1. Пример неплотной и плотной конформации

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 конформацю как модель Изинга. В каждом узле конформации 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 кластернным 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 конформациях, так же сравнил их с точными решениями для одномерной модели Изинга.

Результаты замеров кластерным и односпиновым апдейтом совпадают в пределах погрешности.

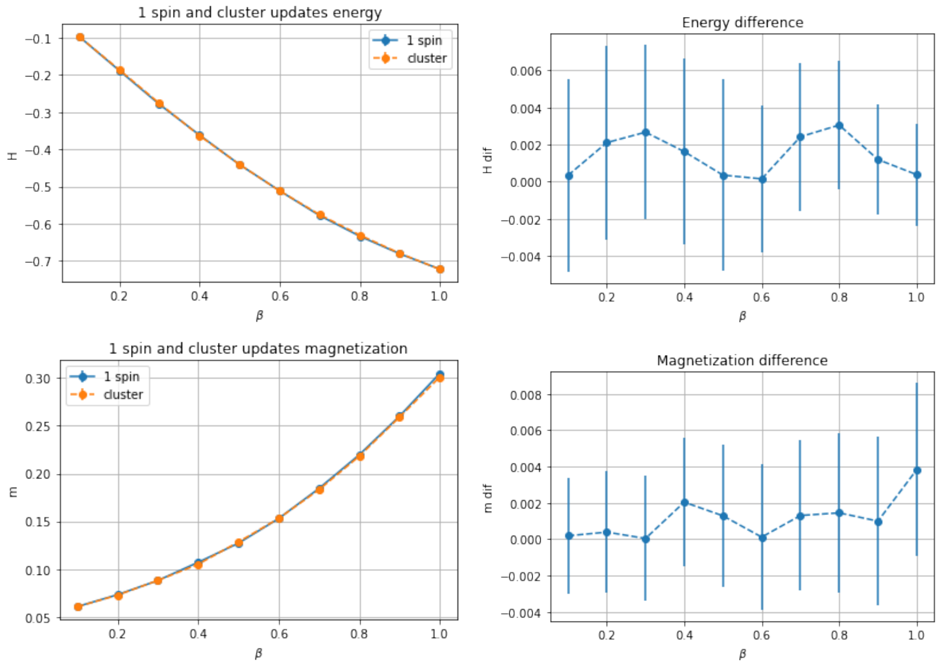
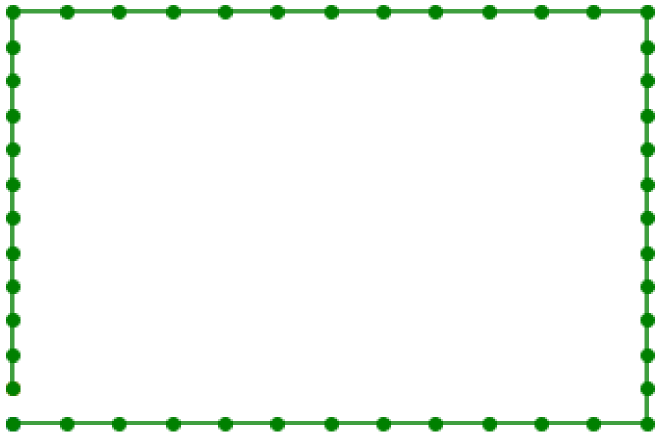
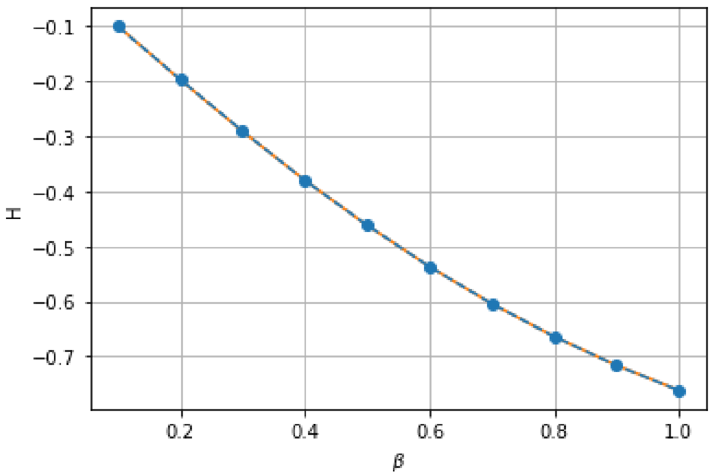


Рис. 2. кластерный и односпиновый апдейт

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



(a) Конформация эмитирующая одномерную модель



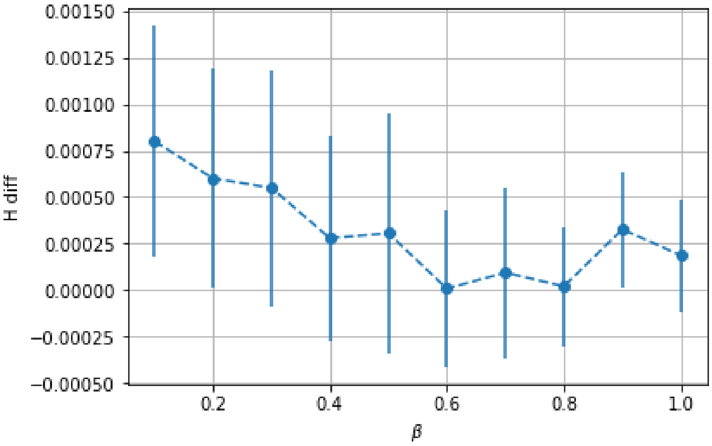


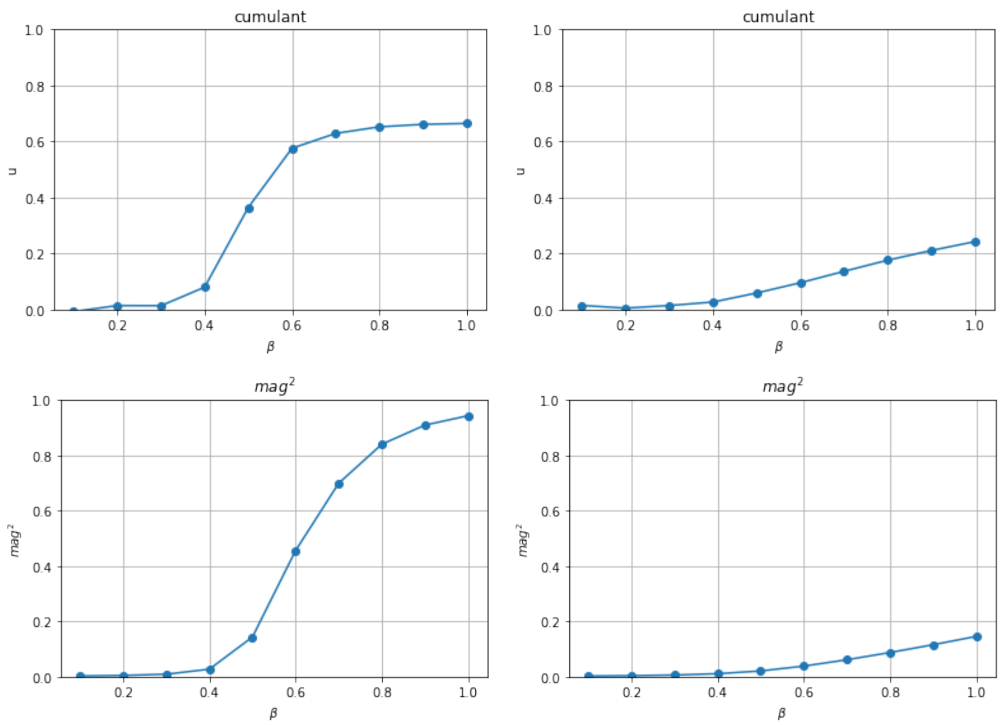
Рис. 3. Сравнение с точным решением одномерной модели

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

3 Замеры

3.1 $U = 1$

Для вычислений я сгенерировал по 100 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.



(a) Плотная (b) Неплотная

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

Для определения "плотности"реплики вычисляется её 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. Реплики размера 250, 500, 1000, 2000 отбрасываются если их радиусы больше 7.7, 13.5, 18, 25 соответственно, доля отброшенных реплик 0.54, 0.35, 0.37, 0.47 соответственно. Для размеров 500, 1000, 2000 я подбирал радиусы для разделения по значению кумулянта при $\beta = 1$ (рис. **??**), для 250 я так же ориентировался на значение намагниченности при $\beta = 1$ (рис. 5). Вместо радиусов удобнее использовать значение, вычисляемое по формуле $R/\sqrt{L}$. Радиусам 7.7, 13.5, 18, 25 и длинам конформаций 250, 500, 1000, 2000 соответствуют значения 0.49, 0.6, 0.57, 0.56.

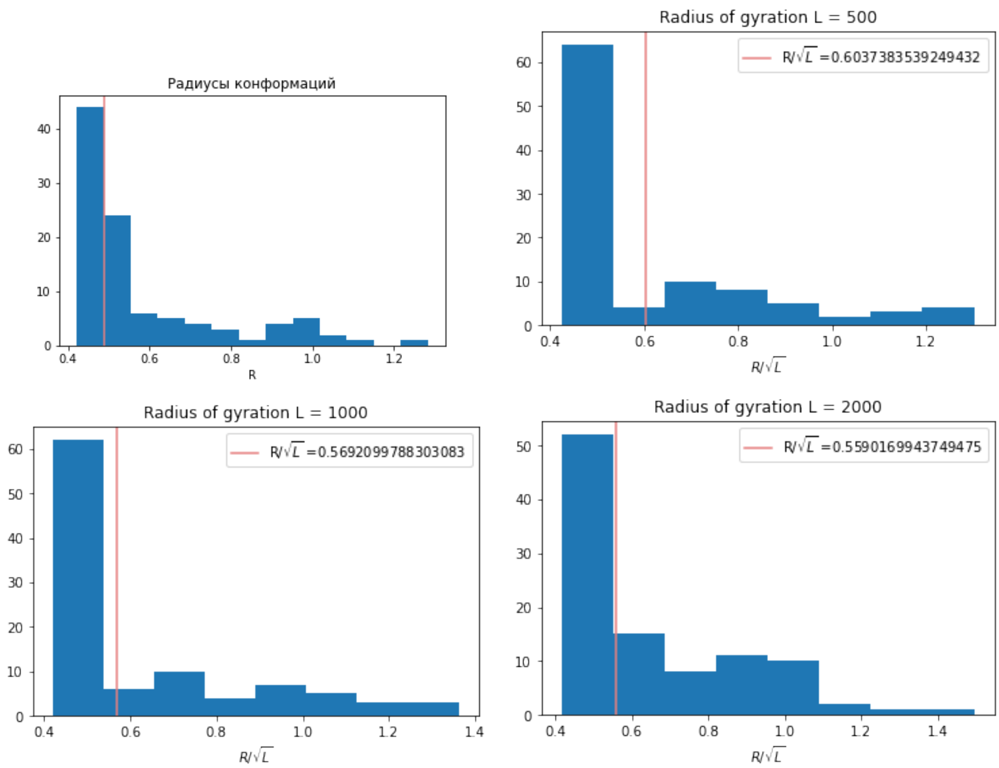


Рис. 5. Гистограммы радиусов полей размеров 250, 500, 1000, 2000

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 $\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\langle U \rangle - U_i)^2}$

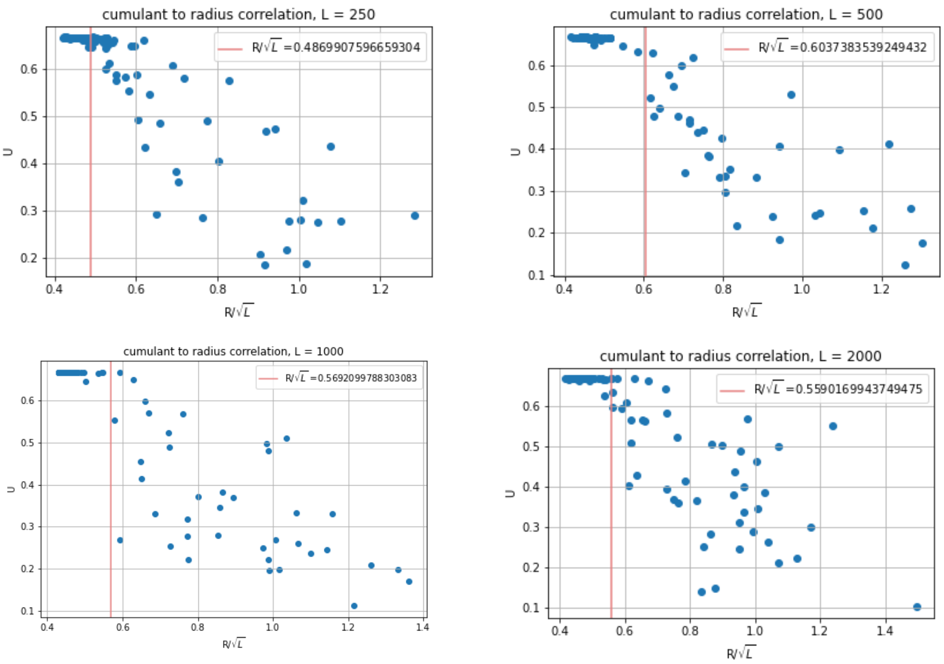


Рис. 6. Корреляция радиусов со значением кумулянта, красными линиями отмечены радиусы по которым отбрасываются конформации(7.7, 13.5, 18, 25)

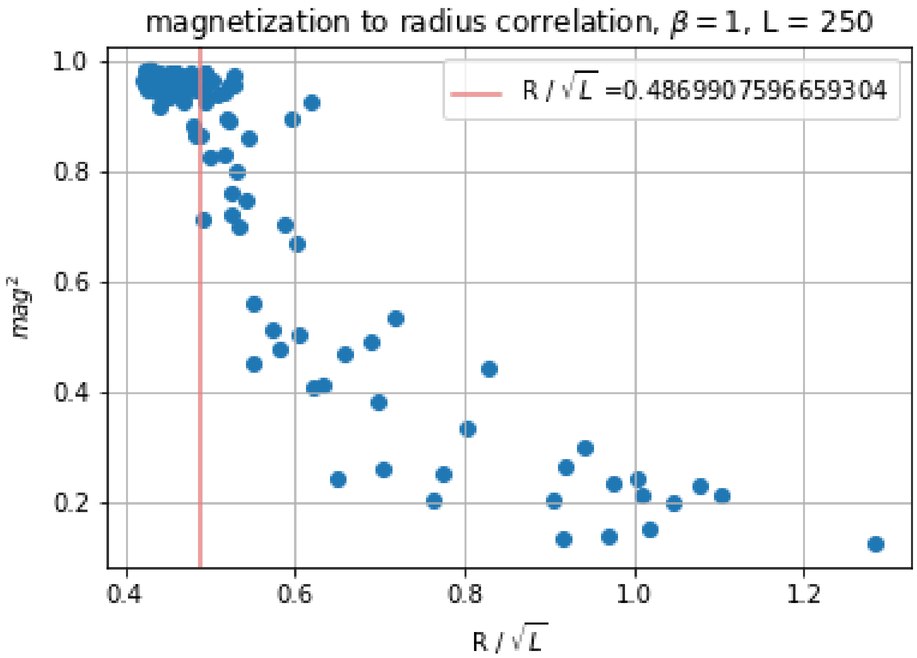


Рис. 7. Корреляция радиусов с квадратом намагниченности, красными линиями отмечены радиусы по которым отбрасываются конформации

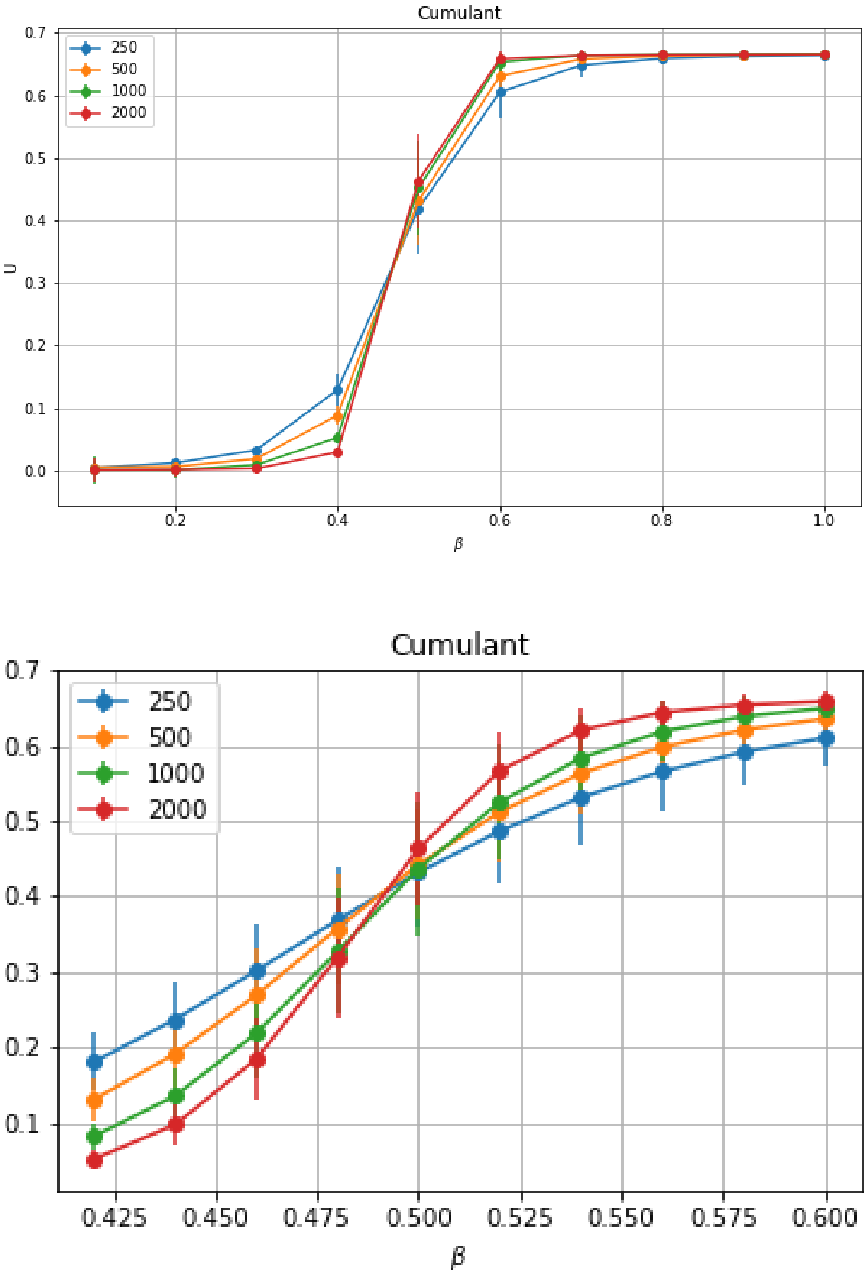


Рис. 8. Значения куулянтов после отбрасывания конформаций по радиусам

Список литературы

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