

摘要

本文利用马尔可夫链的无记忆结合蒙特卡洛，可以消除蒙特卡洛受之前状态的影响，提高精确性和计算速率。利用蒙特卡洛的模拟特性，模拟高分子链的各种微观状态，构建自回避高分子链构象。本文主要是利用蒙特卡洛模拟高分子在一些物质（规则和不规则）的吸附研究。

第一项任务研究了高分子链的在边界物质的吸附能力以及温度的影响；

第二项任务研究了对高分子链构象的性质差异的对比。

文字描述

在文字描述方面更侧重于专有名词的使用，在论述相应观点的时候，会引用相关论文，对阐述的观点进行论据支撑；论述过程追求由浅入深，从来源到方法原理，再到使用方式和应用，使得更容易接受这种方法的算法思想；

综述

第一，针对于计算机、互联网、大数据的大背景，谈论了关于这项技术的重要性和必要性；

第二，针对于本文用到的蒙特卡洛模拟法，对目前已有的几种模拟法进行了论述和说明，对蒙特卡洛这种方法的特性进行了对比，使得整体对蒙特卡罗方法的认识更加清晰；

第三，针对于当前社会的社会需求，对这个方向的研究进行了重要性和必要性的论述；

第四，对本文的书写框架进行了简要说明，便于读者了解和选读。

论文框架

整个框架：蒙特卡洛原理 --> 建模 --> 实验效果 --> 对比效果 --> 总结。

即，先对使用的方法的原理进行阐释和学习；再谈利用之前聊的方法进行怎样的建模，建模的过程和实现；接着对这个建模后的数据进行实验，对实验结果进行归纳；由于这个吸附性有着规则和不规则（存在斑状）两种物质的特点，所以这一部分对不规则进行实验，并进行差异性对比；最后对整个实验进行总结，以及未来这种方式的可行性以及方向。

成果

1. 在格子模型中实现高分子链的建模。
2. 对高分子链在不同温度、不同形状、不同物质下的吸附性进行了模拟和实验，对高分子在这些情况下的形状表达、特性变化进行了记录和对比。
3. 利用模拟退火机制，既实现了跳出局部最优，又对温变的影响做了数据统计。
4. 针对于高分子链在不同环境下的性质，做出了相应的公式结论以及变化范围归纳。

额外知识

蒙特卡罗方法：本文提到一种模拟法，一种随机抽样技术。这种方法其实就是典型的 n/N 计量法，历史上经典的面积计算，在一个可测面积里面，画一个不规则区域，然后向里面撒豆子，根据豆子的比例可以大致估算出这个不规则区域的面积。（假设条件：豆子彼此不重叠且都在该区域内。豆子越多，结果越精确）

马尔可夫链：一种随机过程。最经典的特性就是“无记忆”性，最通俗的解释就是下一个状态只与当前状态有关，而与之前无关，即： $X_{t+1} = F(t)$ ， F 为某种变换。

MPI (Message Passing Interface)：本文用到的并行计算，可以极大的提高计算速度。

模拟退火机制：一种让个体退出当前最优解而重新去区域里面寻找下一个最优解，用于使得蒙特卡洛退出当前局部最优解。因为蒙特卡洛方法生成的高分子链在陷入局部最优解时，整体能量较小，不易找到全局最优。因为高分子链对于温度的变化也比较敏感，在进行退火的时候，会不断记录平均时间下的热力学性质各项数据，不断重复这个过程，直到降到最低温，足够跳出当前最优解。

相关

在水污染处理中，可以用类似的方式，对CAST工艺中各种物质进行分析，找出最佳的处理点，对CAST工艺进行优化，加入并行计算，也可以加速我们的计算和收敛速度。