

# Проект №19455 "Решетчатые модели макромолекул"

Пчелинцев Илья Игоревич, БПМ-192

## Содержание

<b>1</b>	<b>Литературный обзор</b>	<b>2</b>
1.1	Livne, Meirovich: Polymers Adsorbed on a surface . . . . .	2
1.1.1	Особенности модели блуждания . . . . .	2
1.1.2	Подробнее о статсумме и методе Сканирования . . . . .	2
1.1.3	Результаты работы . . . . .	2
1.2	Madras, Sokal: The Pivot Algorithm . . . . .	3
1.2.1	Основные принципы алгоритма . . . . .	3

# 1 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.

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

### 1.1.1 Особенности модели блуждания

В работе [1] 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) [1].

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

$$Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) = \sum_j \exp(-\epsilon m_j(0)/k_b T) \quad (1.1)$$

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

$$p_k(v|b, z_{k-1}, v_{k-1}) = Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) / \sum_v Z_k(v, b, z_{k-1}, v_{k-1}) \quad (1.2)$$

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

$$P_i(b) = \prod_{k=1}^N p_k(v_k|b, z_{k-1}, v_{k-1}) \quad (1.3)$$

### 1.1.3 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 найдено не было.

## 1.2 Madras, Sokal: The Pivot Algorithm

Работа [2] повествует о работе и эффективности алгоритма Пивота в изучении модели случайного блуждания без самопересечений (СБС).

### 1.2.1 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. Вторым методом становится крайне времязатратным при большой длине цепочки, поэтому при  $N \geq 2400$  чаще применялась термализация 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:

$$\begin{aligned}\langle \omega_N^2 \rangle &\sim N^{2\nu} \\ \langle S_N^2 \rangle &\sim N^{2\nu}\end{aligned}$$

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".

## Список литературы

- [1] 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.
- [2] 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.