学习报告

黄金

2019 年 9 月 14 日

1 coil-coil 模型

1.1 解传播子方程

$$\frac{\partial q(r,s)}{\partial s} = \nabla^2 q(r,s) - W(r)q(r,s) \tag{1}$$

$$\frac{\partial q^+(r,s)}{\partial s} = \nabla^2 q^+(r,s) - W(r)q^+(r,s) \tag{2}$$

计算方法：二阶算子分裂、傅里叶变换

（以正向传播子 (1) 为例）

整理得：

$$\frac{\partial q(r,s)}{\partial s} = [\nabla^2 - W(r)]q(r,s) \tag{3}$$

$$\frac{\partial q(r,s)}{q(r,s)\partial s} = [\nabla^2 - W(r)] \tag{4}$$

方程两边同时对 s 积分，积分范围为 s 到 s+h:

$$\int_s^{s+h} \frac{\partial q(r,t)}{q(r,t)\partial t}\, dt = [\nabla^2 - W(r)]h \tag{5}$$

整理得：

$$q(r,s+h) = e^{[\nabla^2 - W(r)]h} q(r,s) \tag{6}$$

利用二阶算子分裂解（6），令:

$$q(r,s+h) = e^{[\nabla^2 - W(r)]h} q(r,s) \tag{7}$$
$$= e^{[L_1+L_2]h} q(r,s) \tag{8}$$
$$= e^{L_1 h/2} e^{L_2 h} e^{L_1 h/2} q(r,s) \tag{9}$$

对于算子 L_1:

$$\frac{\partial q(r,s)}{\partial s} = \nabla^2 q(r,s) \tag{10}$$

利用傅里叶变换得:

$$\frac{\partial \widehat{q}(r,s)}{\partial s} = -k^2 \widehat{q}(r,s) \tag{11}$$

从而，第 n 步到第 n+1/2 步的递推式为:

$$\widehat{q}^{n+1/2}(r,s) = e^{(-k^2)h/2} \widehat{q}^{n}(r,s) \tag{12}$$

对于算子 L_2:

$$\frac{\partial q(r,s)}{\partial s} = -W(r) q(r,s) \tag{13}$$

整理得，第 n 步到第 n+1 步的递推式为:

$$q^{n+1}(r,s) = e^{-W\ r)} q^{n}(r,s) \tag{14}$$

二阶算子分裂：在第 n 步到第 n+1 步的计算中，将初始条件带入算子 L_1 的上述递推式，对递推结果进行 IFFT，作为算子 L_2 的初始条件代入递推式中，对递推结果进行 FFT，作为初始条件代入算子 L_1 的上述递推式，对递推结果进行 IFFT，得到解函数 q(r,s)

1.2 计算单链配分函数

计算方法：傅里叶变换，四阶离散格式

四阶离散格式：

$$\int_0^{n_s} f(s)\,ds = \Delta s \left[-\frac{5}{8}(f_0 + f_{n_s}) + \frac{1}{6}(f_1 + f_{n_s-1}) - \frac{1}{24}(f_2 + f_{n_s-2}) + \sum_{j=0}^{n_s} f_j \right] \tag{15}$$

$$Q = 1/v \int q(r,s)q^{+}(r,s)\,dr \qquad \forall s \in [0,1] \tag{16}$$

$$= 1/v \int q(r,1)q^{+}(r,1)\,dr \tag{17}$$

$$= 1/v \int q(r,1)\,dr \tag{18}$$

$$= \widehat{q}(0,1) \tag{19}$$

$$\Phi_A(r) = 1/Q \int_0^f q(r,s)q^{+}(r,s)\,ds \tag{20}$$

$$\Phi_B(r) = 1/Q \int_f^1 q(r,s)q^{+}(r,s)\,ds \tag{21}$$

1.3 更新场函数

交替迭代法

$$\frac{\partial \mu_+}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta \mu_+} \qquad = \Phi_A(r) + \Phi_B(r) - 1 \tag{22}$$

$$\frac{\partial \mu_-}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta \mu_-} \qquad = \Phi_A(r) - \Phi_B(r) - \frac{2\mu_-(r)}{\chi N} \tag{23}$$

以差商近似代替导数，有：

$$\mu_+^{n+1} = \mu_+^n + (\Phi_A(r) + \Phi_B(r) - 1)dt \tag{24}$$

$$\mu_-^{n+1} = \mu_-^n + (\Phi_A(r) - \Phi_B(r) - \frac{2\mu_-(r)}{\chi N})dt \tag{25}$$

1.4 计算哈密顿量

计算方法：类似于求 Q

$$H[\mu_+, \mu_-] = \frac{n}{V} \int (-\mu_+ + \frac{1}{\chi N}\mu_-^2)\,dr - nlogQ \tag{26}$$

2 存在的问题及计划

对该问题的算法具体细节认识不够清楚，希望接下来学习模型的编程，便于更好的掌握它。