

Osobine samonepresecajućih puteva u ravni

Samo-nepresecajuće putanje predstavljaju dobar model, pre svega za različite osobine makro-molekula. I pored svoje jednostavnosti, parametri modela se retko kad mogu naći analitičkim putem. U ovom radu su ispitivane neke od osobina samo-nepresecajućih putanja na kvadratnim, trougaonim i šestougaonim mrežama u ravni, uz pomoć Monte Karlo simulacija.

Geometrija razmatranih mreža

Mreža je objekat koji se sastoji od tačaka sa celobrojnim koordinatama u n -dimenzionom prostoru, koje zovemo čvorovima mreže, i linija koje ih povezuju, koje zovemo vezama mreže. Veze među čvorovima se zadaju pomoću skupova vektora sa celobrojnim koordinatama $\{y_i\}$, tako da je čvor x_i povezan sa skupom čvorova $\{x_i + y_i\}$. Te čvorove zovemo susedima čvora x_i . Broj elemenata skupa $\{y_i\}$, ako je isti za sve čvorove zvaćemo koordinativnim brojem i obeležavati ga sa c .

Mreže koje se uzimaju u razmatranje u ovom radu su dimenzije **2** i njihove veze mogu se definisati pomoću jednog skupa za kvadratnu ($\{(1,0), (-1,0), (0,1), (0,-1)\}$) i trougaonu mrežu ($\{(1,0), (-1,0), (0,1), (0,-1), (1,1), (-1,-1)\}$), dok su za definisanje veza na šestougaonoj mreži potrebna dva skupa, tj. moramo posebno razmotriti čvorove sa parnim i neparnim zbirom koordinata. Jedan način definisanja je da za skup za "parne" čvorove uzmemo ($\{(0,1), (1,0)\}$), a za "neparne" ($\{(0,-1), (-1,0), (1,0)\}$).

Kretanje po mreži

Pri razmatranju kretanja po mreži moramo se osvrnuti na dva najjednostavnija tipa: *random walk*, kretanje kod koga su svi pravci ravnopravni, i *nonreversing walk*, kretanje kod koga se prvi korak može napraviti na bilo koji od susednih čvorova, a svaki sledeći je moguć samo na neki od čvorova koji nisu bili posećeni u prethodnom koraku. Jedan podskup *nonreversing walk*-a je posebno zanimljiv. To je *self-avoiding walk*, kretanje kod koga se ne sme dva puta posetiti isti čvor.

Biljana Gajić (1982), Beograd, V. Bogišića 4, učenica 4. razreda Matematičke gimnazije u Beogradu

Broj samonepresecajućih puteva

Kombinatorni problem određivanja broja puteva date dužine kod *random walk*-a i *nonreversing walk*-a je trivijalan. Za *random walk* taj broj je na mreži sa koordinativnim brojem c jednak c^n , dok za *nonreversing walk* iznosi $c(c-1)^{n-1}$, gde je n broj koraka. Određivanje broja samonepresecajućih puteva date dužine je znatno složeniji problem, zapravo do sada analitički nerešiv. Jedina rešenja nađena do sada su za konkretne vrednosti n i ostvarena su uz pomoć moćnih računara. Granica za n , za koju možemo odrediti tačan broj samonepresecajućih puteva, je direktno zavisna od trenutne razvijenosti računarske tehnologije, zbog eksponencijalne složenosti problema. Ipak, moguće je naći približna rešenja za broj samonepresecajućih puteva i za veće n od onog koji je trenutna granica određivanja tačnog broja.

Algoritam

Postoje razni načini za određivanje približnog broja samonepresecajućih puteva. Jedan je generisanje slučajnog n -cifrenog broja osnove $c-1$, gde svaka cifra označava jedan pravac kretanja i proveravanje da li je putanja kodirana tim brojem samonepresecajuća. Drugi, koji je ovde korišćen, sastoji se u sledećem: kreće se iz tačke $(0,0)$ i u prvom koraku na slučajan način bira se jedan od susednih čvorova. U svakom sledećem koraku na slučajan način bira se neki od $c-1$ susednih čvorova koji nije bio posećen u prethodnom koraku. To se nastavlja sve dok je put samonepresecajući. Algoritam se ponavlja više puta (10^9) i beleži se koliko puta je nađen samonepresecajući put neke dužine. Neka je $B(n)$ broj nađenih samonepresecajućih puteva dužine n . Zavisnost je eksponencijalna, tj. $B(n) = A e^{\alpha n}$. Ako je N ukupan broj iteracija, važi:

$$N = \sum_{n=1}^{n_{\max}} B(n) = \sum_{n=1}^{n_{\max}} A e^{\alpha n_{\max}}$$

Kada je n_{\max} dovoljno veliko, važi:

$$N = \int_1^{n_{\max}} A e^{\alpha \cdot n} dn = \frac{A}{\alpha} \left(e^{\alpha \cdot n_{\max}} - e^{\alpha} \right)$$

Ako sa $f_c(n)$ označimo broj samonepresecajućih puteva dužine n na mreži sa koordinativnim brojem c , tada je:

$$f_c(n) \approx \frac{c(c-1)^{n-1}}{N} \cdot \sum_{i=n}^{n_{\max}} B(i) \quad (1).$$

Dalje imamo:

$$f_c(n) \approx \frac{A}{\alpha n} \cdot \left(e^{\alpha \cdot n_{\max}} - e^{\alpha \cdot n} \right) \cdot c \cdot (c-1)^{n-1} \approx$$

$$\approx \left(1 - \frac{A}{\alpha N} \cdot e^{\alpha \cdot n} \right) \cdot c \cdot (c-1)^{n-1}$$

Ispitivanjem zavisnosti $B(n)$ za različite vrednosti N , dobija se da je zavisnost parametra A od N linearna, a da je α konstanta. Ako uzmemo $A = A' \cdot N + A''$, zavisnost $f_c(n)$ možemo predstaviti u obliku:

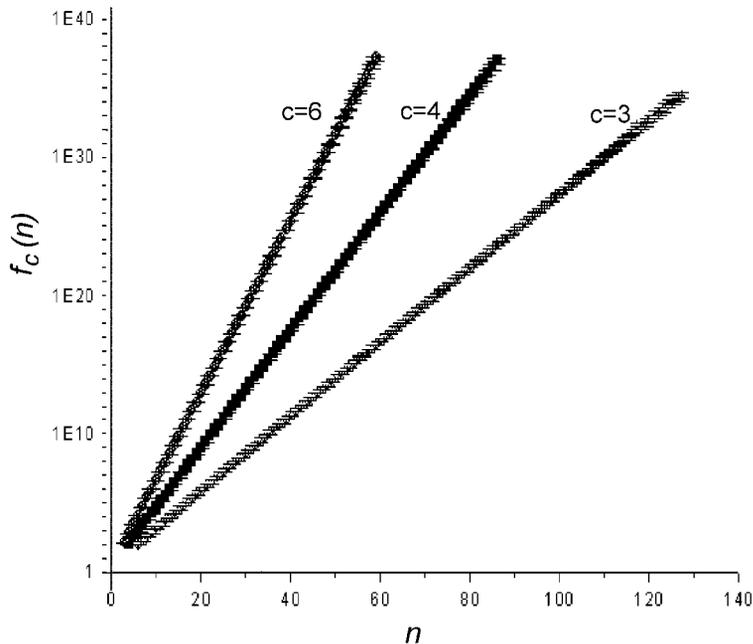
$$f_c(n) \approx \left(1 - \left(A' + \frac{A''}{N} \right) \cdot \frac{1}{\alpha} \cdot e^{\alpha \cdot n} \right) \cdot c \cdot (c-1)^{n-1}$$

odakle se zaključuje da je zavisnost $f_c(n)$ za veliko N (što je ulazni parametar simulacije) eksponencijalna funkcija.

Ako tu zavisnost predstavimo u obliku $f_c(n) = F \cdot f''$ za parametre F i f dobijamo:

Tip mreže	c	F	ΔF	f	Δf
kvadratna	4	1.84	0.014	2.733	0.003
trougona	6	1.70	0.013	4.354	0.007
šestougaona	3	2.16	0.017	1.884	0.001

Vrednost dobijena za f za kvadratnu mrežu odstupa 2% od vrednosti prezentovane u (Finch 2000).



Slika 1.
Zavisnost broja samonepresecajućih puteva dužine n od n

Figure 1.
Dependence of number of self-avoiding walks with length n from n

Sa grafika (slika 1) direktno se očitava $f(n)$. Broj samonepresecajućih putanja se sa greškom manjom od 50% određuje do dužine 86 za kvadratnu mrežu, 59 za trougaonu mrežu i 127 za šestougaonu mrežu. Rezultati se slažu sa tačnim brojevima samonepresecajućih putanja prezentovanim kod Hayes-a (1998 *a, b*) i Madars-a (1999). Naravno, granica do koje se može izračunati tačan broj samonepresecajućih krivih je manja od pomenutih dužina za koje se ovom metodom dobijaju rezultati sa relativnom greškom od 50%. Ovi rezultati se mogu popraviti jer je greška funkcija broja iteracija. Program kojim su generisane približne zavisnosti $f_c(n)$ za 10^9 iteracija izvršavan je dva dana na računaru sa procesorom *Intel Celeron* 300 MHz, a vreme linearno zavisi od broja iteracija.

Fraktalna dimenzija samonepresecajućih puteva

U ovom radu određivana je fraktalna dimenzija samonepresecajućih putanja na kvadratnoj i trougaonoj mreži.

Iako se simulacijama kretanja opisanim u prethodnom delu dobijaju samonepresecajuće putanje ograničene dužine (što nikako ne predstavlja fraktal), činjenica je da proizvoljan *random walk*, *nonreversing walk* ili *self-avoiding walk* iste dužine zauzimaju potpuno drugačiju oblast mreže, pa je za očekivati da bi kada bismo mogli da generišemo dovoljno dugačke samonepresecajuće putanje, one imale neke osobine fraktala. Odnos dužine samonepresecajuće krive i radijusa oblasti koju zauzima na mreži bio bi osobina koja bi nam dala fraktalnu dimenziju po masenoj definiciji Schroeder-a (1999).

Prva stvar koja se mora definisati, da bi se moglo govoriti o radijusu oblasti koja pokriva posmatranu putanju, je rastojanje na mreži, tj. njena metrika.

Metrika razmatranih mreža

Rastojanje između tačaka $X(x_1, x_2, \dots, x_n)$ i $Y(y_1, y_2, \dots, y_n)$ n -dimenzi-onog prostora je:

$$d(X, Y) = \left(\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Jasno je da je ovako definisana metrika u našem slučaju neupotrebljiva. Rastojanje između dve tačke na mreži definisaćemo kao najmanji broj koraka potreban da se od jedne tačke stigne po mreži u drugu, takozvano *taksi-rastojanje* (Krause 1986).

Za kvadratnu mrežu, rastojanje tačke $A(x, y)$ od koordinatnog početka je dato izrazom $d(A) = |x| + |y|$, a za trougaonu mrežu moramo razmotriti dva slučaja. Ako se tačka A nalazi u drugom ili četvrtom kvadrantu rastojanje je isto kao i kod kvadratne mreže, $d(A) = |x| + |y|$, a ako se nalazi u prvom ili trećem kvadrantu važi $d(A) = \max\{|x|, |y|\}$.

Algoritam

Fraktalna dimenzija određivana je na sledeći način. Prvo su odbačene sve putanje čija je dužina manja od neke granice g . Preostale putanje se tada mogu smatrati beskonačno dugim jer se posmatra njihov oblik na rastojanjima manjim od g .

Neka je proizvoljna samonepresecajuća putanja data nizom tačaka na mreži (x_{ij}) dužine n_i , gde $i, j \in \{1, 2, \dots, N\}$, gde je N broj putanja. Onda je "masa" samonepresecajućih krivih na rastojanju manjem ili jednakom r data izrazom:

$$M(r) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \Phi(x_{ij}, r)$$

gde je

$$\Phi(x, r) = \begin{cases} 1, & d(x) \leq r \\ 0, & d(x) > r \end{cases}$$

Sa grafika zavisnosti $M(r)$, slika 2, vidi se da je $M(r)$ stepena funkcija za $r \ll g$. Kako se r povećava, sve više do izražaja dolaze efekti konačne dužine posmatranih putanja, tj. dolazi do zasićenja, kao što se vidi na grafiku. Znači za malo r važi:

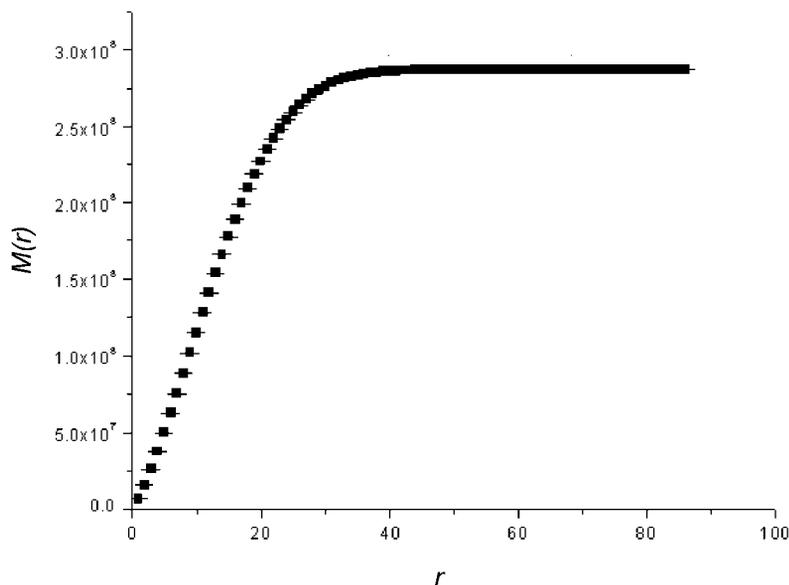
$$M(r) = C \cdot r^d$$

gde je d tražena fraktalna dimenzija.

U ovom radu za granicu uzimano je $g = 30, 40, i 50$ i posmatrana je zavisnost $M(r)$ za $r < 10$. Dobijeni su sledeći rezultati, gde je za fraktalnu dimenziju uzeta srednja vrednost onih dobijenih za različite granice:

Tip mreže	Fraktalna dimenzija d	Δd
kvadratna	1.23	0.02
trougaona	1.18	0.02

Granica g se ne može proizvoljno povećavati pošto se broj samonepresecajućih putanja koje ostaju u razmatranju drastično smanjuje.



Slika 2.
Zavisnost ukupnog broja čvorova, koji se nalaze na rastojanju r za sve samonepresecajuće puteve duže od granice $g = 50$, od r za kvadratnu mrežu

Figure 2.
Dependence of total number of knots at distance r for all self-avoiding walks with length greater than 50, from r , for square lattice

Zasićenje na grafiku pokazuje očiglednu činjenicu da se za dovoljno veliko r skoro svi čvorovi nalaze na rastojanju od koordinatnog početka manjem od r .

Grafici za druge granice i mreže su slični.

Komentari

Razmatrani putevi po mrežama u ravni mogu se efikasno koristiti kao model za konformacije proteina (Hayes 1998), tako što se u čvorove mreže postave aminokiseline, povezane vezama na mreži. Na taj način je protein predstavljen kao samonepresecajuća putanja. Obično se u najjednostavnijim modeliranjima razmatraju samo dva tipa aminokiselina, gde je jedan tip hidrofilan a drugi polaran i problem savijanja proteina se svodi na nalaženje optimalnog samonepresecajućeg puta, tako da broj vodoničnih veza bude što veći. Moguće primene samonepresecajućih puteva su i u modeliranju adsorpcije polimera, gde se zapravo razmatraju samonepresecajuće putanje u poluprostoru (Whittington 2001).

Istraživanje se može nastaviti ispitivanjem samonepresecajućih puteva, pri čemu verovatnoće kretanja nisu iste u svim pravcima (Madars 1999). Time se mogu modelirati polimeri orijentisani poljem.

Literatura

- Finch S. 2000. Self-Avoiding-Walk Connective Constants.
<http://www.mathsoft.com/mathresources/constants/discretestructures/article/0,,2204,00.html>
- Hayes B. 1998 a. Prototeins. *American Scientist*, **86** (3, May-June): 216
- Hayes B. 1998 b. How to Avoid Yourself. *American Scientist*, **86** (4, July-August)
- Krause E.F. 1986. *Taxicab Geometry – An Adventure in Non-Euclidean Geometry*. New York: Dover Publications
- Madras N. 1999. Self-avoiding walks with drift. *Canadian Mathematical Society Winter Meeting*. Montreal, December 11–13, 1999. Department of Mathematics and Statistics, York University, Toronto, Ontario, M3J-1R3
- Schroeder M. 1999. *Fractals, Chaos, Power Laws*. Freeman
- Whittington S. 2001. Mini Course of Polymer Models. *University of Toronto, Canada*

Biljana Gajić

Certain Characteristics of Self-avoiding Walks in Plane

Self-avoiding walks represents a good model for different features of macro-molecules, i.e. polymers, proteins or nucleic acids. In spite of the model's simplicity, many important parameters of the model cannot be determined analytically. Main objective of this work was to investigate and describe certain characteristics of self-avoiding walks on square, triangular and hexagonal lattice in 2D using Monte Carlo simulations.

