

# 附录 A 自洽场计算辅助分析软件

## A.1 软件概述

嵌段共聚物中至少包含两种化学组成不同的重复单元，且重复单元在分子链中以嵌段的形式存在。嵌段共聚物中的不同嵌段受制于化学共价键所导致的连通性，相分离无法在宏观的尺度上发生，仅能在分子链的尺度发生微观相分离，该现象也称为嵌段共聚物自组装。通过调节嵌段组成、不同组分之间相互作用强度以及分子链拓扑结构等因素，从而调控影响自组装过程中焓与熵的微妙平衡，可以使得嵌段共聚物具有丰富且复杂的自组装行为。

自洽场理论是研究嵌段共聚物自组装行为最有效的工具之一。由于自洽场理论具有较为繁复的公式以及多种求解算法，从零开始编写功能齐全自洽场理论程序具有一定门槛。幸运的是，据我们所知，已有研究者在开发系统化的自洽场理论计算平台<sup>[130,151]</sup>。但是，自洽场理论计算软件的进一步发展和推广仍有两个问题尚需解决。一方面，为了保障软件在求解自洽场方程组时具有较高的计算效率，大多数软件中并不包含配套的图形化界面。该问题导致使用者在提交运算任务、收集计算结果以及分析计算结果等方面的效率有所降低。另一方面，不同的自洽场理论软件开发者会有不同的编程习惯，因此不同软件之间没有统一的输入和输出格式。该问题则导致使用者无法对不同软件的计算结果进行快速的比较和验证。

基于以上问题，我们利用 Python 开发了自洽场计算辅助分析软件。该软件致力于为自洽场理论计算软件提供便捷的命令行工具，并对其输出结果进行相关的计算和可视化。与此同时，该软件为不同格式的数据提供了规范化的模板，从而有望为不同的计算软件提供快捷的文件格式转换。该软件目前提供两种不同的调用形式。首先是面向可编程群体的基于代码的调用形式，该形式赋予了使用者最大的灵活度以及全部功能权限。其次，本软件提供了面向于非编程群体的基于网页端服务的可视化交互界面，为部分常用功能实现了便于使用的图形界面。目前，该软件仍在根据需求不断更新迭代，以优化功能的代码实现细节以及拓展新的功能。本论文中大部分图像可以通过该软件快捷的生成。

## A.2 软件功能

为实现可拓展、标准化的软件架构，本软件主体由以下六个模块组成：

- 数据范式模块（Schema，该英文与程序内的文件名对应，下同）

该模块为软件整体定义了标准统一的数据流以及常用的常量，以便适应不同开发者的编程风格、实现不同功能函数之间相互接洽以及增加软件的可拓展和可迭代性。其由四个子模块构成：

- (1) 变量类型（Types）：定义各函数接口中形参的数据类型。
- (2) 枚举类（Enums）：枚举不同功能模块下可选择的计算模式。
- (3) 标准数据流结构体（Structs）：为不同计算结果提供标准化模板。
- (4) 标签类（Labels）：主要为可视化模块提供预定义的数据标签。

- 工具库模块（Toolkits）

该模块主要提供辅助性功能，对通用的函数进行了预定义并实现了各类文件的读取及转换。其由三个子模块构成：

- (1) 通用函数（Function）：包含数值寻优、文件路径查找等常见函数。
- (2) 数据读取接口（Reader）：对自洽场理论计算软件各类输入文件及输出文件进行读取和转化。
- (3) .xml 文件格式转换（Xmltrans）：将 GALAMOST<sup>[152]</sup> 输出的.xml 格式文件转为自洽场软件可读的输入文件。

- 数据可视化模块（Artist）

该模块集中实现了能量变化曲线绘制、嵌段密度分布绘制、相图绘制等可视化功能，致力于快捷地为数据分析提供直观的图像支撑。目前由五个子模块构成：

- (1) 绘图通用函数（Plotter）：为不同的绘图模块提供插件式的功能函数，包括但不限于颜色自动生成、绘制标签、自动保存等。
- (2) 曲线图绘制（Compare）：各类数据的绝对值曲线以及相对值曲线绘制，在后者中会根据输入对象自动计算相对值。
- (3) 密度场可视化（Isosurface）：二维及三维的密度场绘制。
- (4) 等高线图绘制（Landscape）：如本论文中的自由能形貌图。
- (5) 相图绘制（Phase）：绘制各类有序结构的相转变边界。

- 分析计算模块（Calculator）

该模块主要实现相关的科学计算，并辅以一定的可视化。现有四个模块：

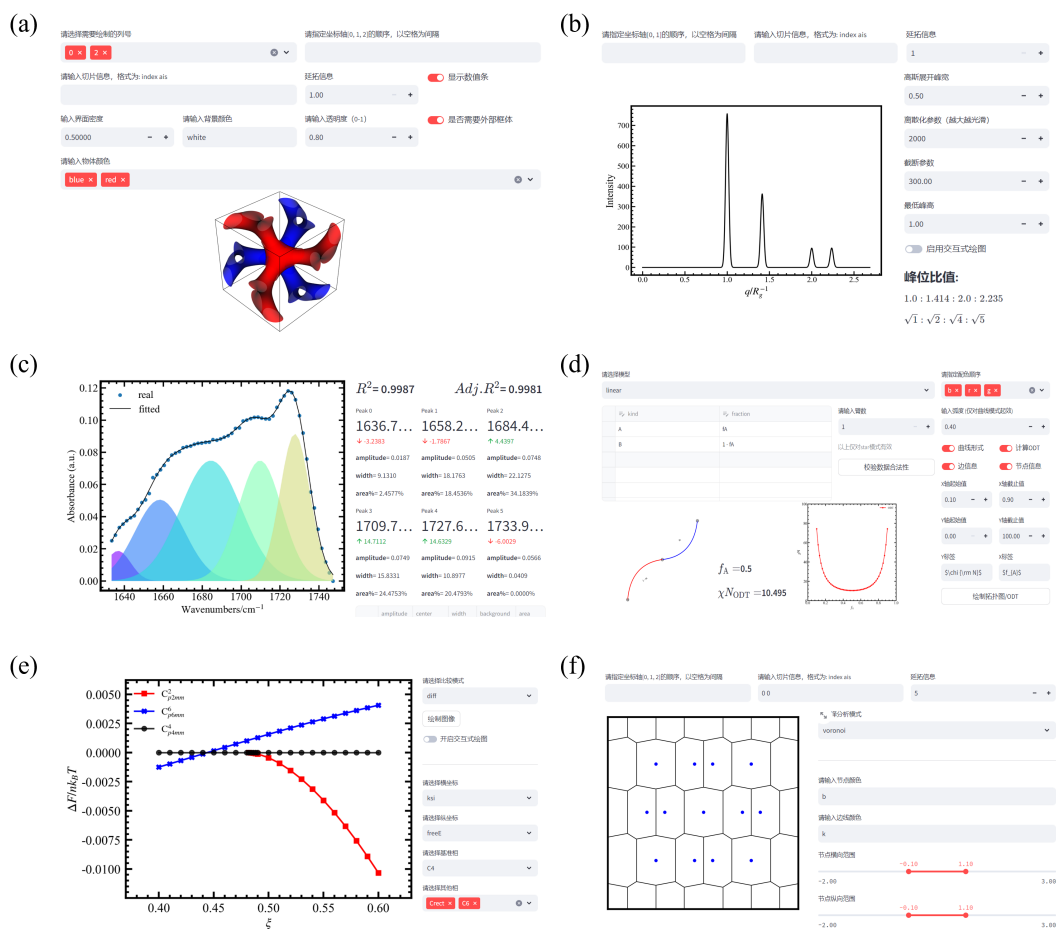


图 A-1 本软件提供的部分网页端服务界面。(a) 密度场可视化；(b) 基于密度场进行散射；(c) 曲线分峰计算；(d) 分子链拓扑结构可视化以及随机相位近似计算；(e) 曲线图绘制；(f) 基于密度场进行 Voronoi 剖分。以上界面的截取日期为 2024 年 3 月 10 日，后续由于版本迭代界面可能会存在差异。

- (1) **Voronoi 剖分 (Voronoi)**: 基于计算机视觉算法，对密度场进行 Voronoi 剖分，目前仅支持对二维密度场进行计算。
- (2) **结构散射计算 (Scatter)**: 基于密度场进行散射计算，得到相应结构的散射峰，可用于确定对称性。
- (3) **随机相位近似 (Topo)**: 可对任意 AB 型且拓扑结构中无环的嵌段共聚物进行随机相位近似 (random phase approximation, RPA) 计算以求得其有序-无序相转变点 (order-disorder transition, ODT)，并提供了分子链拓扑结构的可视化功能。
- (4) **曲线分峰 (Peak)**: 对具有复杂峰形的数据进行处理，通过高斯拟合识别并分离各个峰。

- 辅助脚本模块 (SCFTRunner)

该模块的核心功能是在计算集群上实现便捷的批量化计算任务提交，以及在计算完成后对计算结果进行数据收集、数据删除、重新运算、接续运算等功能。

- (1) 工具函数 (Utils): 与自洽场计算输入文件进行交互的函数主体，定义了多个枚举类以便控制函数的实际执行行为。
  - (2) 特殊初始化类 (Phases): 预定义了多种微相结构的特殊初始化数据，可用于自洽场理论计算软件的输入。
  - (3) 嵌段共聚物的抽象客体 (Agents): 针对各类嵌段共聚物体系建立抽象客体，以针对性的根据脚本输入修改自洽场软件输入文件。
  - (4) 脚本主体 (Scripts): 用于在计算集群上批量化提交运算任务的脚本程序，以及对运算结果进行数据收集或者其他操作的脚本程序。
- 网页端服务模块 (Web)

该模块基于上述部分核心功能开发了面向非编程群体的网页端交互界面，其部分功能如图 A-1所示。

- (1) 网页控件单元 (Unit): 每个页面中的常用控件及函数。
- (2) 页面文件 (Pages): 每个功能不同的网页对应一个独立的页面文件。