

Задание

Моделирование полимерной звезды на решетке численным методом самосогласованного поля Схойтенса-Флира

В данной задаче используется одноградиентный метод, то есть вместо трехмерного пространства рассматривается одномерное направление от поверхности прививки цепей. Этот метод использовался в диссертационной работе Олега Рудя (стр.46), но с учетом электростатических взаимодействий (рисунки из этой диссертации).

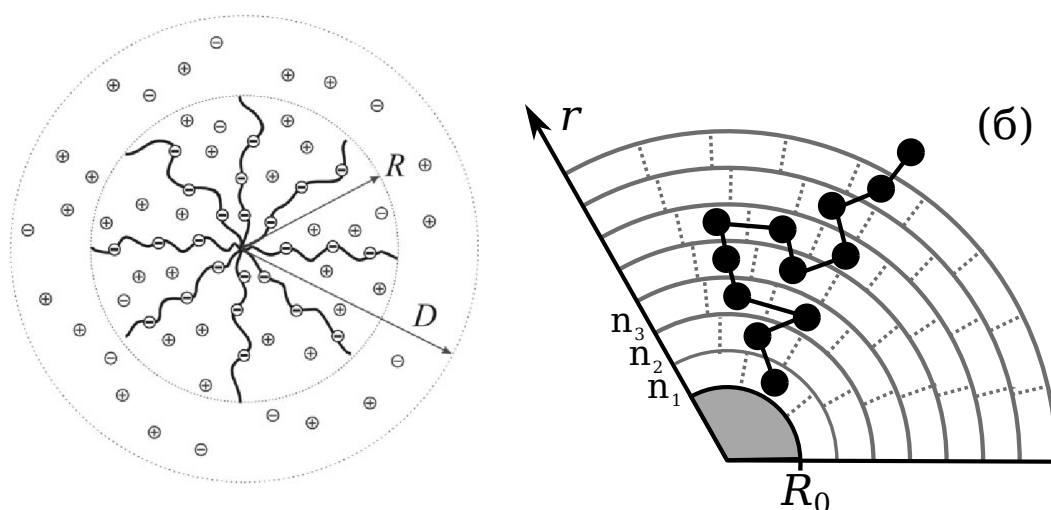


Рис. 1 – (а) Звезда с 8-мью лучами (в нашей задаче не будет маленьких отдельных шариков с плюсами и минусами, которые обозначают со-ионы и противоионы), б) Блуждание цепи в криволинейной геометрии

Входные данные:

N - длина цепи в одном луче звезды, число шариков

n - число лучей

M - число слоев $M \geq N$

η - скорость (шаг сходимости алгоритма ($0 < \eta \leq 1$, обычно $\eta = 0.1, 0.01$))

δ - точность (tolerance) метода сходимости

max_step - максимальное число шагов в алгоритме

Другие параметры:

$\theta = nN$ - число звеньев в звезде (мы не учитываем центральный шарик звезды - он зафиксирован в нулевом слое радиуса $R_0 = 0.5$, а рассматриваем только лучи)

$\lambda_{-1} = \lambda_{+1} = 1/6$, $\lambda_0 = 1 - \lambda_{-1} - \lambda_{+1}$ - вероятности переходов из слоя в слой в плоской геометрии,

Вероятности переходов $\lambda_{r,r'}$ в сферической геометрии определялась через площади контактов двух слоев A и число ячеек L следующим образом:

$$\lambda_{r,r+1} = \lambda_{+1} \frac{A(r)}{L(r)} \quad (1)$$

$$\lambda_{r,r-1} = \lambda_{-1} \frac{A(r-1)}{L(r)} \quad (2)$$

$$\lambda_{r,r} = 1 - \lambda_{r,r+1} - \lambda_{r,r-1} \quad (3)$$

Сферическая геометрия задает следующие формулы для расчета поверхности контакта двух слоев A и числа ячеек в слое L :

$$\begin{aligned} A(r) &= 4\pi(r + R_0)^2, \\ L(r) &= \frac{4}{3}\pi \left(3(r + R_0)^2 - 3(r + R_0) + 1 \right), \end{aligned} \quad (4)$$

где $R_0 = 0.5$ - радиус нулевого слоя, в котором расположен центральный шарик звезды, в этот слой занят (граничное условие - стенка) и выпадает из общего рассмотрения.

Использовать:

Входной файл, в котором задаются входные данные

Вектора (vector) вместо динамических массивов

Описание алгоритма: В каждой ячейке могут располагаться мономерные звенья двух сортов: p - полимер, w - растворитель. Массивы хранят значения

по слоям $r = 0, M + 1$ (но в пропагаторах нас интересует $r = 1, M$) и по номеру мономерного звена $s = 1, N$

1. Считать входные данные из файла
2. Провести подготовку, vector-ы (координаты по M слоям удобно хранить от 0 до $M + 1$ - слои 0-й и $(M + 1)$ -й для граничных условий), все начальные значения массивов - нули
3. Использовать метод неподвижной точки (схема Пикара) для поиска состояния системы с минимальной энергией F с максимальным числом шагов max_step , k -й шаг алгоритма выглядит так:

- (a) Рассчитываем распределение Больцмана стат. весов G_p (полимера), то есть вероятностей нахождения мономеров в слое:

$$G_p(r) = \exp(-u_p(r)) \quad (5)$$

и стат.весов растворителя:

$$G_w(r) = \exp(-u_w(r)) \quad (6)$$

- (b) Пропагаторы для расчета вероятностей нахождения шариков цепи относительно поверхности прививки

Прямой пропагатор - начинаем блуждание с привитого мономера ($s = 1$):

$$G_{forw}(r = 1, s = 1) = G_p(r = 1) \quad (7)$$

шаг:

$$G_{forw}(r, s + 1) = G_p(r) \cdot \left(\lambda_{r-1,r} G_{forw}(r - 1, s) + \lambda_{r,r} G_{forw}(r, s) + \lambda_{r+1,r} G_{forw}(r + 1, s) \right) \quad (8)$$

Обратный пропагатор - начинаем блуждание с концевго мономера ($s = N$):

$$G_{back}(r, s = N) = G_p(r), \quad r = \overline{1, M} \quad (9)$$

шаг:

$$G_{back}(r, s - 1) = G_p(r) \cdot \left(\lambda_{r-1,r} G_{back}(r - 1, s) + \lambda_{r,r} G_{back}(r, s) + \lambda_{r+1,r} G_{back}(r + 1, s) \right) \quad (10)$$

граничные условия:

наверху - зеркальные условия

$$\begin{aligned} G_{forw}(M + 1, s) &= G_{forw}(M, s), \\ G_{back}(M + 1, s) &= G_{back}(M, s) \end{aligned} \quad (11)$$

внизу - стенка:

$$\begin{aligned} G_{forw}(0, s) &= 0, \\ G_{back}(0, s) &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

(с) q - стат. сумма цепи:

$$q = \sum_r L(r) \left[\sum_s \frac{G_{forw}(r, s) G_{back}(r, s)}{G_p(r)} \right] \quad (13)$$

(d) Рассчитываем профили плотности полимера и растворителя:

$$\varphi_p(r) = \frac{\theta}{q} \sum_s \frac{G_{forw}(r, s) G_{back}(r, s)}{G_p(r)} \quad (14)$$

$$\varphi_w(r) = G_w(r) \quad (15)$$

(e) Рассчитываем поле Лагранжа (самосогласованное поле) $\alpha_k(r)$ по схеме Пикара:

$$\alpha_k(r) = \alpha_{k-1}(r) + \eta (\varphi_p(r) + \varphi_w(r) - 1) \quad (16)$$

(f) Поле Лагранжа учитывает условие несжимаемости, а так как никаких взаимодействий в системе нет, то это поле описывает потенциальные поля, действующие на полимер и растворитель:

$$\mathbf{u}_{k,A}(r) = \alpha_k(r), \quad A = w, p \quad (17)$$

(g) Проверяем условие остановки при достижении заданной точности $err < \delta$, где отклонение от решения оценивается через невязку условия несжимаемости, т.е. сумму квадратов отклонений от 1-ной плотности в слое на текущем шаге k :

$$err = \sqrt{\sum_r \left[\varphi_p(r) + \varphi_w(r) - 1 \right]^2} \quad (18)$$

4. Вывести в выходной файл в 4 столбика следующие массивы: номер слоя, распределение плотности полимера $\varphi_p(r)$, растворителя $\varphi_s(r)$ и поле Лагранжа $\alpha(r)$.
5. Вывести в консоль радиус инерции цепи R_g и свободную энергию F

Выходные характеристики

1. Радиус инерции R_g

$$R_g = \sqrt{\frac{\sum_r \phi(r) L(r) r^2}{\sum_r \phi(r) L(r)}} \quad (19)$$

2. Свободная энергия F состоит из двух частей

$$F = F_{el} + F_{int} \quad (20)$$

конформационной (эластическое растяжение цепей)

$$F_{el} = -\frac{\theta}{N} \ln \frac{\theta}{q}, \quad (21)$$

и энергии взаимодействий:

$$F_{int} = - \sum_{A=w,p} \sum_r u_A(r) \varphi_A(r) L(r) \quad (22)$$