

Задание

Моделирование дендримера на решетке методом Монте-Карло

Входные данные:

$L = L_x = L_y = L_z$ - размер системы (число ячеек в каждом направлении)

G - число поколений в дендримере,

S - длина спейсера (линейного фрагмента)

n_{MC} - число шагов метода Монте-Карло

p_{obs} - период вывода наблюдаемых (энергии и параметра порядка)

$p_{picture}$ - период вывода снимка системы

n_{start} - число шагов, которые пропускаем (по умолчанию $n_{start} = 0$)

Рассчитать:

Радиус инерции R_g ,

Расстояние от центра до концов R_{c-e}

Использовать:

Входной файл, в котором задаются входные данные

Вектора (vector) вместо динамических массивов

1. Нужно создать либо три массива размера N - число шариков в дендримере:

$$N = 2 + 4S(2^G - 1) \quad (1)$$

для хранения координат x, y, z шариков дендримера и два массива размерности $N - 1$ с номерами связей, то есть всего в дендримере $N - 1$ связь - нужно указать номер первого и второго шариков, между которыми образована связь. Основная сложность вашей задачи правильно задать топологию молекулярной структуры и правильно ей пользоваться.

2. Поместить в ячейки случайным образом шарики дендримера, учитывая, что они связаны.

Ядро дендримера (два шарика, см. рисунок) можно зафиксировать в центре пространства и выбрать размеры L (тогда можно их и не вводить во входном файле) такие

$$L > SG + 1, \quad (2)$$

что дендример никогда своими шариками не сможет достать до границ пространства, тогда вам не нужно заботиться о граничных условиях.

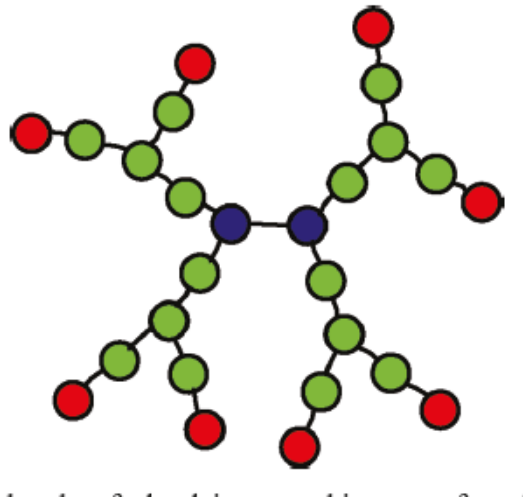


Рис. 1 – Пример дендримера, число поколений $G = 2$, длина линейного фрагмента (спейсера) $S = 2$. Рисунок взят из статьи Klos & Sommer 2009 года.

3. Запустить итерационную процедуру (так как целочисленный тип может хранить числа до определенной величины, то лучше разбить на два цикла) $s_1 = 1, n_{MC}$ и $s_2 = 1, V$
(таким образом, общее число шагов будет $n_{MC} \cdot V$)

(а) Запустить датчик случайных чисел и узнать номер шарика i от 1 до N а значит и его координаты x_i, y_i, z_i

(b) Запустить датчик случайных чисел и узнать число от 1 до 6 - то есть направление dx, dy, dz , в котором будет сделан шаг (считаем, что наша решетка кубическая - каждый шарик может переместиться из своего кубика в один из 6 соседних)

(c) Пытаемся переместить нашу частицу

$$\begin{aligned}x_{new} &= x_{old} + dx \\y_{new} &= y_{old} + dy \\z_{new} &= z_{old} + dz\end{aligned}\tag{3}$$

(d) Для полученных координат $x_{new}, y_{new}, z_{new}$ проверить две вещи:

а) занята ли уже эта ячейка другим шариком

б) узнаем может ли быть построены связи с этим шариком. Длина связи b может немного меняться, т.е. быть в таких пределах:

$$1 \leq b \leq \sqrt{3}\tag{4}$$

- это когда по диагонали.

(e) Таким образом мы предполагаем, что на место $x_{new}, y_{new}, z_{new}$ перешла частица 1, которая была на месте $x_{old}, y_{old}, z_{old}$, а на её место пришла частица 2 из $x_{new}, y_{new}, z_{new}$ (простой обмен позициями)

(f) если шаг принят, то меняем местами значения $\sigma_{x_{old}, y_{old}, z_{old}}$ и $\sigma_{x_{new}, y_{new}, z_{new}}$

4. Если номер текущего шага $i - n_{start}$ кратен $n_{picture}$, то вывести .ent файл или .pdb файл (в последнем случае можно писать в один файл траекторию моделирования через заданный интервал $n_{picture}$).

5. Если номер текущего шага $i - n_{start}$ кратен n_{obs} , то вывести во внешний файл номер текущего шага, радиус инерции R_g , R_{c-e} на данном шаге (факультативно: число принятых шагов, время в миллисекундах с начала

работы программы). То есть каждый раз в этот момент файл будет переоткрываться и будет вставляться новая запись.

Радиус инерции:

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left((x_i - x_c)^2 + (y_i - y_c)^2 + (z_i - z_c)^2 \right)} \quad (5)$$

Координаты центра масс:

$$\begin{aligned} x_c &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \\ y_c &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i, \\ z_c &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i \end{aligned} \quad (6)$$

где (x_i, y_i, z_i) - координаты i -того шарика дендримера

Число концевых шариков в дендримере:

$$N_t = 2^{G+1} \quad (7)$$

Расстояние от центра до концевых шариков:

$$R_{c-e} = \sqrt{\frac{1}{N_t} \sum_{j=1}^{N_t} \left((x_j^{(t)} - x_c)^2 + (y_j^{(t)} - y_c)^2 + (z_j^{(t)} - z_c)^2 \right)} \quad (8)$$

где $(x_j^{(t)}, y_j^{(t)}, z_j^{(t)})$ - координаты j -того концевых шарика дендримера

Анализ равновесных свойств дендримеров с помощью данного алгоритма (для построения графиков можно воспользоваться программой OriginLab):

1. Построить зависимость радиуса инерции R_g от номера шага (с помощью файла, в который происходил вывод) и убедиться, что радиус инерции

выходит на флуктуации рядом с некоторым постоянным значением. Момент выхода t_{eq} энергии на плато можно считать моментом, когда система пришла в состояние равновесия

2. Найти автокорреляционную функцию от радиуса инерции R_g :

$$C_{O_b}(t) = \frac{\langle O_b(t)O_b(0) \rangle - \langle O_b \rangle^2}{\langle O_b(0)O_b(0) \rangle - \langle O_b \rangle^2} \quad (9)$$

$\langle \cdot \rangle$ - усреднение по всем конфигурациям, под O_b понимается R_g

Найти время корреляции τ : $C(0)/C(\tau) = e$ (уменьшается в e раз)

3. Сделать новые расчеты с $n_{start} = t_{eq}$ и $p_{obs} = 2\tau$, $n_{MC} = 10000\tau$ (либо использовать параметры для этих значений из статьи Klos & Sommer) для каждого поколения $G = 1, 2, \dots, G_{max}$ при некоторой фиксированной длине S
4. Для каждого расчета найти среднее R_g по всем снимкам и построить график $y = R_g/S^{3/5}$, $x = (N/S)G^2$.